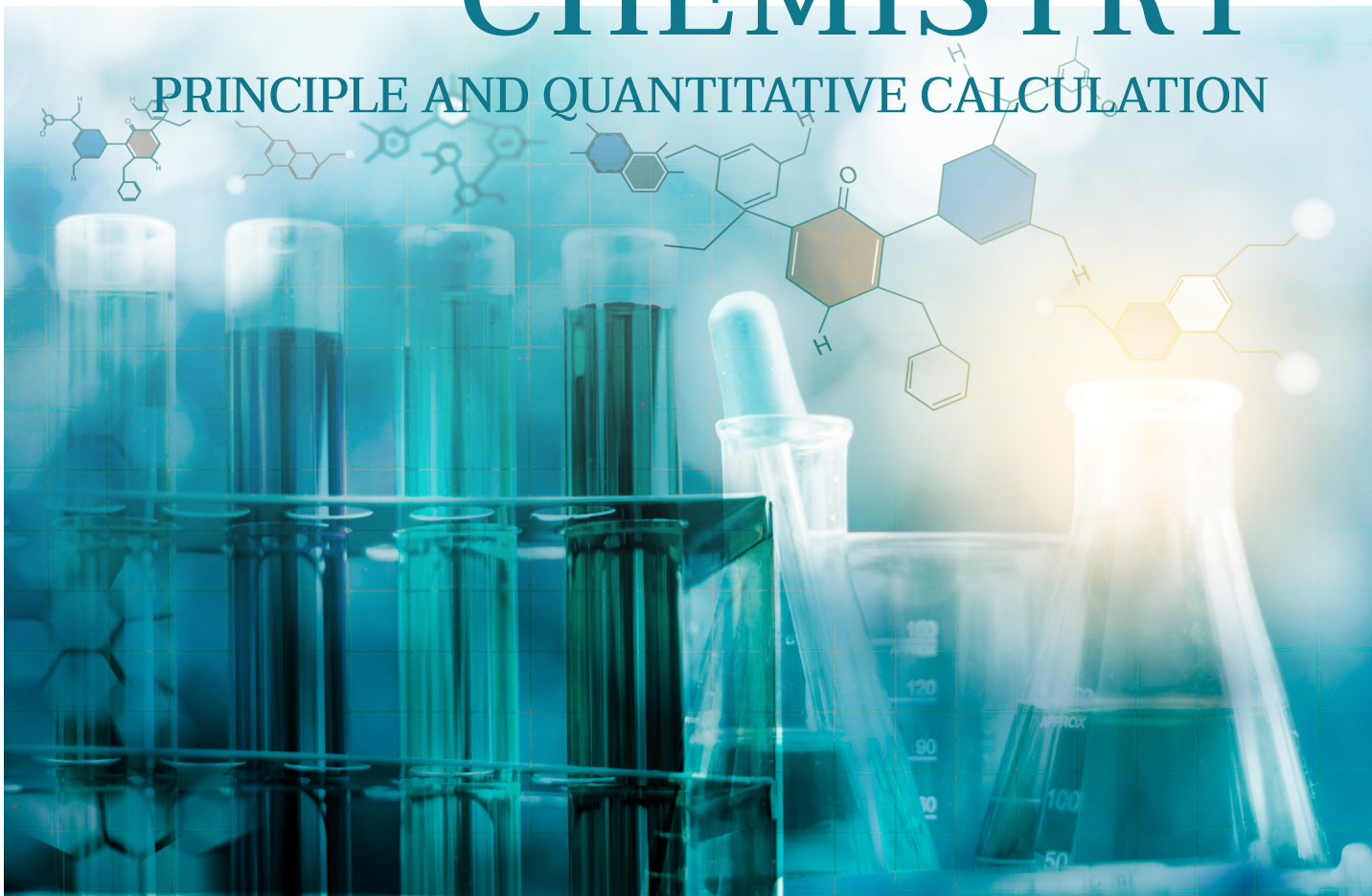


เคมีวิเคราะห์

หลักการและเทคนิคการคำนวณเชิงปริมาณ

ANALYTICAL CHEMISTRY

PRINCIPLE AND QUANTITATIVE CALCULATION



วรัชย์ จันทรสุวรรณ

เคมีวิเคราะห์

หลักการและเทคนิคการคำนวณเชิงปริมาณ

เคมีวิเคราะห์
หลักการและเทคนิคการคำนวณเชิงปริมาณ
Analytical Chemistry
Principle and Quantitative Calculation

วริทย์ จันทรสุวรรณ

 **สำนักพิมพ์**
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

2565

350.-

วรวิทย์ จันทรสุวรรณ

เคมีวิเคราะห์ / วรวิทย์ จันทรสุวรรณ

1. เคมีวิเคราะห์ -- เชิงปริมาณ. 2. เคมีวิเคราะห์. 3. เคมี.

543.1

ISBN 978-974-03-4099-7

สปพจ. 2440/2



สรรคคุณค่าวิชาการสู่สังคม

Knowledge to All

www.cupress.chula.ac.th

สิทธิในการผลิตและพิมพ์หนังสือเล่มนี้เป็นของสำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัยแต่ผู้เดียว
การผลิตและการลอกเลียนหนังสือเล่มนี้ไม่ว่ารูปแบบใดทั้งสิ้น
ต้องได้รับอนุญาตเป็นลายลักษณ์อักษรจากสำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

จัดทำโดย สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ครั้งที่ 1 จำนวน 800 เล่ม พ.ศ. 2563

ครั้งที่ 2 จำนวน 800 เล่ม พ.ศ. 2565

www.cupress.chula.ac.th [CUB 6503-012]

โทร. 0-2218-3562-3

บรรณาธิการอำนวยการ : นางอรทัย นันทนาติศัย

รองศาสตราจารย์ ดร.อรุณ หาญสืบสาย

กองบรรณาธิการฝ่ายวิชาการ : ศาสตราจารย์กิตติคุณ ดร.ปิยนารถ บุนนาค

รองศาสตราจารย์ ดร.พิมพ์พันธ์ เดชะคุปต์

รองศาสตราจารย์ นายแพทย์ชิษณุ พันธุ์เจริญ

รองศาสตราจารย์ ดร.วิมลวรรณ พิมพ์พันธ์ุ

ผู้ประสานงาน : วาสนา ชำชื่น

พิสูจน์อักษร : นิตยา ฤกษ์ถนอม

ออกแบบปก : สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ออกแบบรูปเล่ม : วรวิทย์ จันทรสุวรรณ

ผู้จัดทำนาย : ศูนย์หนังสือแห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ถนนพญาไท เขตปทุมวัน กรุงเทพฯ 10330

โทร. 0-2218-9872 โทรสาร 0-2254-9495

Call Center (จัดส่งทั่วประเทศ) โทร. 0-2255-4433 <http://www.chulabook.com>

ร้านค้าติดต่อ : แผนกขายส่ง สาขาหัวหมาก โทร. 0-2374-1375-6 โทรสาร 0-2374-1374

customer@chulabook.chula.ac.th, info@chulabook.chula.ac.th

Apps: CU-eBook Store

คำนำ

พิมพ์ครั้งที่ 2

หนังสือ เคมีวิเคราะห์ (หลักการและเทคนิคการคำนวณเชิงปริมาณ) เล่มนี้ได้เรียบเรียงขึ้นและเผยแพร่ครั้งแรกเมื่อปี พ.ศ. 2563 โดยผู้เขียนมีความตั้งใจอย่างมากที่จะเรียบเรียงหนังสือเล่มนี้ให้ดีที่สุดเพื่อให้เป็นส่วนหนึ่งของรากฐานศาสตร์แห่งเคมีวิเคราะห์ที่มีขอบเขตอย่างกว้างขวางและเกี่ยวข้องกับสัมพันธ์กับศาสตร์อื่น ๆ ในหลาย ๆ มิติ ผู้เขียนหวังเป็นอย่างยิ่งว่าหนังสือเล่มนี้จะเป็นส่วนหนึ่งในการศึกษาเพิ่มพูนความรู้ ความเข้าใจ และทักษะการคำนวณเชิงปริมาณสำหรับนิสิต นักศึกษา นักวิจัย และผู้ที่สนใจที่จะสามารถประยุกต์ใช้ในการศึกษาทุกระดับ การประกอบวิชาชีพ และการค้นคว้าวิจัยต่อไป

หนังสือเล่มนี้ได้จัดพิมพ์ขึ้นเป็นครั้งที่สอง และได้มีการเพิ่มเนื้อหา และแก้ไขข้อผิดพลาด ซึ่งบางส่วนได้รับข้อเสนอแนะจากผู้อ่านหนังสือที่จัดพิมพ์ครั้งแรก อย่างไรก็ตาม หากมีข้อเสนอแนะใดที่พึงจะเป็นส่วนแก้ไขข้อผิดพลาด เพิ่มส่วนความสมบูรณ์ ขยายความเข้าใจและช่วยในการส่งเสริมการศึกษาเรียนรู้ ผู้เขียนยินดีน้อมรับนำไปพิจารณาเพื่อปรับปรุง แก้ไข หรือเพิ่มเติม ให้มีความสมบูรณ์ยิ่งขึ้นต่อไป

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วรวิทย์ จันทรสุวรรณ

มกราคม 2565

คำนำ

พิมพ์ครั้งที่ 1

หนังสือ เคมีวิเคราะห์ (หลักการและเทคนิคการคำนวณเชิงปริมาณ) เล่มนี้ได้เขียนและเรียบเรียงขึ้นจากประสบการณ์ที่ได้รับการศึกษาเล่าเรียนในทุกระดับ การค้นคว้าวิจัย และการเป็นผู้สอนรายวิชาเคมีวิเคราะห์ หลักสูตรสำหรับนักศึกษาระดับปริญญาตรี เนื่องจากผู้เขียนได้ตระหนักถึงสภาพปัญหาสำคัญเกี่ยวกับความรู้พื้นฐานทางเคมี การคำนวณเชิงปริมาณ และความเข้าใจในหลักการปฏิกิริยาทางเคมีวิเคราะห์ โดยเฉพาะนิสิต นักศึกษาที่เรียนรายวิชาเคมีวิเคราะห์ตามหลักสูตรที่มีรายวิชาพื้นฐานทางเคมีไม่ครบถ้วนหรือไม่ครอบคลุมตามศาสตร์แห่งเคมีวิเคราะห์ การที่จะให้ผู้เรียนเข้าใจในหลักการของเคมีวิเคราะห์อย่างลึกซึ้งนั้นอาจทำได้ยาก เนื่องจากศาสตร์แห่งเคมีวิเคราะห์ไม่ได้เป็นหลักวิชาทางทฤษฎีหรือการลงมือปฏิบัติทดลองเพียงเท่านั้น แต่ยังเป็นการนำองค์ความรู้ของศาสตร์ต่าง ๆ และประสบการณ์มาบูรณาการร่วมกันเพื่อใช้ในการแก้ปัญหา การหาคำตอบของปัญหาตามวิธีการทางวิทยาศาสตร์ หรือการพัฒนาเพื่อก่อให้เกิดซึ่งองค์ความรู้ใหม่ ๆ ในด้านการวิเคราะห์สารที่สนใจ

ผู้เขียนมีความตั้งใจอย่างมากที่จะเรียบเรียงหนังสือเล่มนี้เพื่อให้เป็นส่วนหนึ่งของรากฐานศาสตร์แห่งเคมีวิเคราะห์ และหวังเป็นอย่างยิ่งว่าหนังสือเล่มนี้จะเป็นส่วนหนึ่งในการเพิ่มพูนความรู้ ความเข้าใจ และทักษะการคำนวณเชิงปริมาณ สำหรับนิสิต นักศึกษา นักวิจัย และผู้ที่สนใจ สามารถประยุกต์ใช้ในการศึกษา การประกอบวิชาชีพ และการค้นคว้าวิจัยต่อไป

ผู้เขียนขอขอบคุณ คณะบุคคล หน่วยงาน และส่วนที่เกี่ยวข้องที่ให้การสนับสนุนในด้านต่าง ๆ ผู้ทรงคุณวุฒิพิจารณาคุณภาพที่ให้คำแนะนำหลักวิชาการอันลึกซึ้ง คณะครู อาจารย์ทุกท่านที่สั่งสอน ถ่ายทอดความรู้และประสบการณ์อันเชี่ยวชาญจนสามารถนำความรู้เหล่านั้นมาเรียบเรียงเป็นหนังสือเล่มนี้จนสำเร็จ ขอขอบคุณ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลพระนคร คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี ที่ให้โอกาสและสนับสนุนทรัพยากรต่าง ๆ อันก่อให้เกิดองค์ความรู้ทางวิชาการ และสุดท้ายขอขอบคุณครอบครัวที่เป็นกำลังใจที่ดีเสมอมา

อย่างไรก็ตาม หากมีข้อแนะนำอันใดที่พึงจะเป็นส่วนแก้ไขข้อผิดพลาด เพิ่มส่วนความสมบูรณ์ ขยายความเข้าใจและช่วยในการส่งเสริมการศึกษาเรียนรู้ ผู้เขียนยินดีน้อมรับนำไปพิจารณาเพื่อปรับปรุง แก้ไข หรือเพิ่มเติม ให้มีความสมบูรณ์ยิ่งขึ้นต่อไป

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วรวิทย์ จันทร์สุวรรณ
กุมภาพันธ์ 2563

สารบัญ

หน้า

คำนำ

สารบัญ

บทที่ 1 หลักเบื้องต้นเกี่ยวกับการวิเคราะห์เชิงปริมาณ

1.1 ความหมายของเคมีวิเคราะห์	1
1.2 ความสำคัญของเคมีวิเคราะห์	2
1.3 การจำแนกการวิเคราะห์ทางเคมี	4
1.4 ศัพท์ทางเคมีวิเคราะห์	5
1.5 การแบ่งวิธีวิเคราะห์	7
1.6 ขั้นตอนในการวิเคราะห์	11

บทที่ 2 หน่วยทางเคมีและการเตรียมสารละลาย

2.1 หน่วยเอสไอ	23
2.2 ตัวเลขนัยสำคัญ	27
2.3 หน่วยน้ำหนักและหน่วยปริมาตร	29
2.3.1 หน่วยน้ำหนัก	29
2.3.2 หน่วยปริมาตร	32
2.4 โมล	32
2.5 หน่วยความเข้มข้น	35
2.6 การเตรียมสารละลาย	42
2.6.1 การคำนวณการเตรียมสารละลายหน่วยโมลาร์	44
2.6.2 การคำนวณการเตรียมสารละลายหน่วยส่วนในล้านส่วน	48
2.6.3 การคำนวณการเตรียมสารละลายหน่วยนอร์แมล	50
2.6.4 การคำนวณการเตรียมสารละลายหน่วยร้อยละ	51

บทที่ 3 การชักตัวอย่างและการเตรียมตัวอย่าง

3.1 ประเภทการชักตัวอย่าง	55
3.2 ขั้นตอนการชักตัวอย่าง	58
3.2.1 ตัวอย่างที่เป็นของเหลว	58
3.2.2 ตัวอย่างที่เป็นของแข็ง	62
3.2.3 ตัวอย่างที่เป็นแก๊สหรืออากาศ	66

	หน้า
3.3 การเก็บรักษาตัวอย่าง	67
3.4 การเตรียมตัวอย่าง	73
3.4.1 การละลาย	74
3.4.2 การเผาให้เป็นเถ้า	75
3.4.3 การย่อยโดยใช้กรด	76
3.4.4 การย่อยด้วยคลื่นไมโครเวฟ	78
บทที่ 4 การประเมินความน่าเชื่อถือของข้อมูล	
4.1 ค่าเฉลี่ย	88
4.2 การกระจายตัวของข้อมูล	88
4.3 ความคลาดเคลื่อน	91
4.4 การประเมินความแม่นยำและความเที่ยง	95
4.4.1 ความแม่นยำ	95
4.4.2 ความเที่ยง	96
4.4.3 การประเมินความแม่นยำและเกณฑ์การยอมรับ	98
4.4.4 การประเมินความเที่ยงและเกณฑ์การยอมรับ	99
4.5 วัสดุอ้างอิงมาตรฐาน	102
4.5.1 วัสดุอ้างอิงรับรอง	102
4.5.2 วัสดุอ้างอิงรับรองโดยประเทศไทย	104
4.6 การแจกแจงปกติ	105
4.7 ขีดจำกัดความเชื่อมั่น	108
4.8 การทดสอบข้อมูลที่สงสัย	109
4.9 การทดสอบนัยสำคัญของข้อมูล	112
4.9.1 การเปรียบเทียบความเที่ยง	113
4.9.2 การเปรียบเทียบค่าเฉลี่ยของข้อมูล	114
4.10 การวิเคราะห์การถดถอยและสหสัมพันธ์	120
4.11 การทดสอบนัยสำคัญด้วยไมโครซอฟต์เอกซ์เซล	121
4.12 การคำนวณการถดถอยและสหสัมพันธ์ด้วยไมโครซอฟต์เอกซ์เซล	124
บทที่ 5 การคำนวณทางเคมีวิเคราะห์	
5.1 การคำนวณอาศัยหลักปริมาณสัมพันธ์	129
5.2 การคำนวณเกี่ยวกับสมมูลเคมี	131
5.2.1 ภาวะสมมูล	131
5.2.2 การคำนวณค่าคงที่สมมูล	134

	หน้า
5.3 การคำนวณเกี่ยวกับการตกตะกอน	139
5.3.1 การคำนวณสมดุลการละลาย	139
5.3.2 การคำนวณผลคูณของความเข้มข้นไอออน	144
5.4 การคำนวณเกี่ยวกับกรด-เบส	148
5.4.1 การคำนวณการแตกตัวของกรด-เบส	148
5.4.2 การคำนวณค่า pH	153
5.4.3 การคำนวณที่เกี่ยวข้องกับปฏิกิริยาการแยกสลายด้วยน้ำ	155
5.4.4 การคำนวณสารละลายบัฟเฟอร์	157
บทที่ 6 การวิเคราะห์โดยน้ำหนัก	
6.1 บทนำ	161
6.1.1 ประเภทการวิเคราะห์โดยน้ำหนัก	162
6.1.2 สมบัติของตะกอนและตัวตกตะกอน	162
6.2 ขั้นตอนการวิเคราะห์โดยวิธีการตกตะกอน	163
6.3 กระบวนการตกตะกอน	167
6.4 การปนเปื้อนของตะกอน	171
6.5 การตกตะกอนในสารละลายที่เป็นเนื้อเดียวกัน	174
6.6 การเลือกสารที่ใช้เป็นตัวตกตะกอน	175
6.7 การวิเคราะห์โดยน้ำหนักด้วยวิธีทำให้ระเหย	178
6.8 การคำนวณการวิเคราะห์โดยน้ำหนัก	180
บทที่ 7 ปริมาตรวิเคราะห์	
7.1 บทนำ	187
7.2 วิธีการไทเทรต	188
7.3 สารละลายมาตรฐาน	190
7.4 การหาจุดยุติ	191
7.5 อินดิเคเตอร์กรด-เบส	193
7.6 การคำนวณทางปริมาตรวิเคราะห์	195
7.7 การคำนวณความเข้มข้นแน่นอนของสารละลายมาตรฐานทุติยภูมิ	198
7.8 ประเภทการไทเทรต	200
บทที่ 8 เคมีไฟฟ้าพื้นฐาน	
8.1 บทนำ	207
8.2 เลขออกซิเดชัน	209

	หน้า
8.3 การดุลสมการรีดอกซ์	210
8.3.1 การดุลสมการรีดอกซ์โดยวิธีเลขออกซิเดชัน	210
8.3.2 การดุลสมการรีดอกซ์โดยครึ่งปฏิกิริยา	211
8.4 เซลล์เคมีไฟฟ้า	214
8.5 ขั้วไฟฟ้า	218
8.6 ขั้วไฟฟ้าไฮโดรเจนมาตรฐาน	219
8.7 ศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เคมีไฟฟ้า	220
8.8 ศักย์ไฟฟ้ารีดักชันมาตรฐาน	222
8.9 สมการเนินสต์	226
8.9.1 การคำนวณศักย์ขั้วไฟฟ้า	227
8.9.2 การคำนวณศักย์ไฟฟ้าของเซลล์เคมีไฟฟ้า	229
บทที่ 9 การไทเทรตปฏิกิริยากรด-เบส	
9.1 กราฟการไทเทรต	234
9.2 การไทเทรตระหว่างกรดแก่-เบสแก่	235
9.3 การไทเทรตระหว่างกรดอ่อน-เบสแก่ และเบสอ่อน-กรดแก่	243
บทที่ 10 การไทเทรตปฏิกิริยาการเกิดตะกอน	
10.1 จุดยุติของการไทเทรตการเกิดตะกอน	257
10.2 วิธีของโมร์	258
10.3 วิธีของโวลฮาร์ด	260
10.4 วิธีของแฟจเนส	262
10.5 กราฟการไทเทรต	265
10.6 ปัจจัยที่มีผลต่อกราฟการไทเทรต	268
10.7 การประยุกต์ในงานด้านเคมีวิเคราะห์	270
10.8 การคำนวณเกี่ยวกับการวิเคราะห์เชิงปริมาณ	272
บทที่ 11 การไทเทรตปฏิกิริยารีดอกซ์	
11.1 จุดยุติของการไทเทรตปฏิกิริยารีดอกซ์	276
11.2 ศักย์ไฟฟ้าที่จุดสมดุล	278
11.2.1 การไทเทรตที่ไม่มี H^+ หรือ OH^- ในปฏิกิริยารีดอกซ์	279
11.2.2 การไทเทรตที่มี H^+ หรือ OH^- ในปฏิกิริยารีดอกซ์	283
11.3 กราฟการไทเทรต	285
11.4 การสร้างกราฟการไทเทรต	287

	หน้า
11.5 การประยุกต์การไทเทรตปฏิกิริยารีดอกซ์	293
11.5.1 ตัวไทเทรตที่เป็นตัวออกซิไดส์	293
11.5.2 ตัวไทเทรตที่เป็นตัวรีดิวซ์	298
11.6 การคำนวณเกี่ยวกับการไทเทรตปฏิกิริยารีดอกซ์	300
บทที่ 12 การไทเทรตแบบเกิดไอออนเชิงซ้อน	
12.1 สมดุลไอออนเชิงซ้อน	305
12.2 กราฟการไทเทรตแบบเกิดไอออนเชิงซ้อน	310
12.3 สมดุลของไอออนเชิงซ้อน EDTA	312
12.4 ค่าคงที่การเกิดไอออนเชิงซ้อนของ EDTA	316
12.5 ค่าคงที่การเกิดไอออนเชิงซ้อนอย่างมีเงื่อนไข	318
12.6 กราฟการไทเทรตด้วย EDTA	321
12.7 การเติมตัวช่วยทำให้เกิดไอออนเชิงซ้อน	326
12.8 อินดิเคเตอร์สำหรับการไทเทรตด้วย EDTA	327
12.9 การประยุกต์การไทเทรตโดยใช้ EDTA	330
12.10 การคำนวณเกี่ยวกับการไทเทรตแบบเกิดไอออนเชิงซ้อน	332
บทที่ 13 วิธีสเปกโทรสโกปีเบื้องต้น	
13.1 รังสีแม่เหล็กไฟฟ้า	339
13.2 สเปกตรัมรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า	342
13.3 อันตรกิริยาระหว่างโฟตอนกับสาร	344
13.4 ประเภทของสเปกโทรสโกปี	347
13.4.1 สเปกโทรสโกปีแบบดูดกลืน	347
13.4.2 สเปกโทรสโกปีแบบเปล่งออก	348
13.5 การดูดกลืนรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า	350
13.6 กฎของการดูดกลืนแสง	351
13.6.1 กฎของแลมเบิร์ต	353
13.6.2 กฎของเบียร์	353
13.6.3 ข้อจำกัดกฎของเบียร์	356
13.7 กราฟมาตรฐานความเข้มข้น	359
13.8 วิธีวิเคราะห์เชิงปริมาณ	363
13.8.1 วิธีกราฟมาตรฐาน	363
13.8.2 วิธีเติมสารมาตรฐาน	365

	หน้า
บทที่ 14 วิธียูวี-วิสิเบิล สเปกโทรสโกปี	
14.1 การเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของอิเล็กตรอน	369
14.1.1 การเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของไฟ-อิเล็กตรอน ซิกมา-อิเล็กตรอน และอิเล็กตรอนที่ไม่สร้างพันธะ	369
14.1.2 การถ่ายโอนประจุอิเล็กตรอน	378
14.1.3 การเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของอิเล็กตรอนในออร์บิทัลดี	381
14.2 องค์ประกอบเครื่องวัดการดูดกลืนแสง	381
14.3 ชนิดของเครื่องวัดการดูดกลืนแสง	392
14.3.1 เครื่องวัดการดูดกลืนแสงชนิดลำแสงเดี่ยว	393
14.3.2 เครื่องวัดการดูดกลืนแสงชนิดลำแสงคู่	394
 บรรณานุกรม	 397
ภาคผนวก	401
เฉลยแบบฝึกหัดท้ายบท	411
ดรรชนี	415
ตารางธาตุ	421
ประวัติผู้เขียน	423

หลักเบื้องต้นเกี่ยวกับการวิเคราะห์เชิงปริมาณ (Introduction of Analytical Chemistry)

1.1 ความหมายของเคมีวิเคราะห์

เคมีวิเคราะห์ (analytical chemistry) อาจนิยามความหมายได้อย่างกว้างขวางขึ้นอยู่กับขอบเขตที่ศึกษา หรือจุดประสงค์ของการวัดวิเคราะห์ หรือกระบวนการดำเนินการทดสอบโดยอาศัยความรู้ทางเคมี เมอร์เรย์ (Murray, 1994) ได้นิยามเคมีวิเคราะห์แบบง่าย ๆ แต่แฝงด้วยความหมายและความสำคัญอันลึกซึ้งของเคมีวิเคราะห์ตามคำกล่าวของไรลีย์ (Charles Reilly) ที่กล่าวไว้ในปี ค.ศ. 1965 ซึ่งกล่าวไว้ว่า “*Analytical chemistry is what analytical chemists do.*” การกำหนดนิยามอย่างใดอย่างหนึ่งอาจไม่ครอบคลุมถึงแนวคิดพื้นฐานของเคมีวิเคราะห์ได้ทั้งหมด ซึ่งจะพบเห็นได้ตามหนังสือและตำราทั่ว ๆ ไป เมื่อกล่าวถึงเคมีวิเคราะห์ จะแบ่งหมวดหมู่เป็นสาขาวิชาหนึ่งทางวิทยาศาสตร์ หรือสาขาวิชาหนึ่งทางเคมี หรือเป็นสาขาศึกษา (discipline) หรืออาจเป็นสาขาย่อยของสาขาศึกษา (sub-discipline) บ้าง ซึ่งในสารานุกรม (encyclopedia) ได้อธิบายความหมายของเคมีวิเคราะห์อย่างกว้าง ๆ ไว้คือ “Analytical chemistry can be a ‘science’ (the certain knowledge of things from their principles and causes), a ‘part of sciences’ (the body of knowledge of natural, exact and physico-chemical sciences), a ‘discipline’ (a ‘field of study’), a ‘sub-discipline’ of chemistry (if this is considered a discipline), etc.” (Valcarcel, 1997)

การอธิบายความหมายของเคมีวิเคราะห์เป็นสาขาวิชาหนึ่งหรือแขนงวิชาหนึ่งของสาขาเคมีจึงเป็นเพียงการแบ่งหมวดหมู่ตามวิชาอย่างกว้าง ๆ เท่านั้น แต่มินักวิทยาศาสตร์หลายคนมีความคิดเห็นสอดคล้องกันว่า เคมีวิเคราะห์ไม่ควรแยกเป็นสาขาหรือแขนงหนึ่งของสาขาเคมีอย่างสิ้นเชิง แต่ควรเป็นการประยุกต์และบูรณาการความรู้ทางเคมีด้านต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องกับการวัดวิเคราะห์ที่ต้องอาศัยทั้งความรู้พื้นฐาน รวมถึงการประยุกต์ใช้ความรู้เพื่อค้นหาคำตอบทั้งเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณที่ไม่เพียงเฉพาะเป็นการดำเนินการวิเคราะห์แบบงานประจำ แต่ควรเป็นการปรับปรุงวิธีวิเคราะห์ที่มีอยู่เดิม หรือเป็นการขยายขอบเขตวิธีวิเคราะห์กับตัวอย่างชนิดใหม่ หรือเป็นการพัฒนาวิธีวิเคราะห์วิธีใหม่ ๆ ขึ้นมา เพื่อให้การวิเคราะห์มีประสิทธิภาพวิเคราะห์ดีขึ้น เช่น การวิเคราะห์ปริมาณตะกั่วปริมาณน้อย ๆ ในน้ำและดิน จะต้องดำเนินการโดยใช้วิธีวิเคราะห์เชิงสเปกโทรเมตรีที่แตกต่างกัน รวมถึงการเลือกเงื่อนไขและขั้นตอนการทดลองที่ไม่เหมือนกัน เทคนิคการเตรียมตัวอย่าง เทคนิคการวิเคราะห์การใช้เครื่องมือวิเคราะห์ หรือการวิเคราะห์ตัวเลข เป็นความรู้ที่เกิดจากการศึกษาทางเคมีทั่วไปเป็นพื้นฐานที่สำคัญ

ดังที่กล่าวข้างต้น การกำหนดนิยามของเคมีวิเคราะห์ให้สมบูรณ์นั้น อาจทำได้ไม่ครอบคลุมทั้งหมด ในที่นี้จึงขอเสนอานิยามบางส่วนที่กล่าวเกี่ยวกับเคมีวิเคราะห์ ดังนี้

สคูก, เวสต์, และฮอลเลอร์ (Skoog, West, & Holler, 1994) ได้ระบุคำกล่าวของโอสท์วัลด์ (Friedrich Wilhelm Ostwald) ที่ให้นิยามความหมายของเคมีวิเคราะห์ไว้ในหนังสือ Analytical Chemistry ดังนี้ “Analytical chemistry, or the art of recognizing different substances and determining their constituents, takes a prominent position among the applications of science, since the questions which it enables us to answer arise wherever chemical processes are employed for scientific or technical purposes.”

วัลคาร์เซล (Valcarcel, 1997) ได้กล่าวสรุปนิยามสมัยใหม่ของเคมีวิเคราะห์ที่สอดคล้องกับ โอสท์วัลด์ ไว้ดังนี้ “Analytical chemistry is a metrological science that develops, optimizes and applies measuring processes intended to derive quality chemical information of both global and partial type in order to solve the measuring problems posed”

เมอร์เรย์ (Murray, 1991) ให้นิยามของเคมีวิเคราะห์ไว้ว่า “The science of inventing and applying the concepts, principles, and ... strategies for measuring the characteristics of chemical systems”

ฮาร์เวย์ (Harvey, 2016) กำหนดนิยามของเคมีวิเคราะห์ไว้ในหนังสือ Modern Analytical Chemistry 2.0 สรุปไว้ดังนี้ “Analytical chemistry is often described as the area of chemistry responsible for characterizing the composition of matter, both qualitatively (Is there any lead in this sample?) and quantitatively (How much lead is in this sample?).”

จากนิยามข้างต้นจะเห็นได้ว่า เคมีวิเคราะห์จะเกี่ยวข้องกับการวัด (metrology) และวิเคราะห์ (analysis) อย่างเป็นระบบ ซึ่งขอบเขตของเคมีวิเคราะห์ได้ขยายไปครอบคลุมกับศาสตร์สาขาวิชาอื่น ๆ ซึ่งอาจกล่าวได้ว่า เคมีวิเคราะห์สอดแทรกเป็นส่วนหนึ่งของทุกสาขาวิชาที่จำเป็นหรือมีจุดประสงค์เพื่อวิเคราะห์สารที่สนใจในตัวอย่างทั้งเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ ถ้าเปรียบสาขาวิชาเคมีเสมือนเป็นก้อนเค้ก แล้วแบ่งแขนงความรู้ทางเคมีเป็นชิ้นเค้ก เคมีวิเคราะห์ไม่ควรจัดแบ่งเป็นเพียงชิ้นเค้กชิ้นหนึ่งเพียงเท่านั้น แต่ควรเป็นส่วนหน้าเค้กของชิ้นเค้กชิ้นอื่น ๆ อีกด้วย ผู้เขียนมีความเห็นสอดคล้องกับคำอธิบายหรือนิยามดังกล่าวข้างต้น โดยสรุปได้ดังนี้ “เคมีวิเคราะห์ คือ การวิเคราะห์สารที่สนใจ (analyte) ในตัวอย่าง เพื่อต้องการคำตอบที่ถูกต้องอย่างหนึ่งอย่างใดทั้งทางกายภาพ และ/หรือทางเคมี ไม่ว่าจะเป็นคำตอบเชิงคุณภาพหรือเชิงปริมาณ โดยดำเนินการตามขั้นตอนการวิเคราะห์อย่างเป็นระบบ ลดความคลาดเคลื่อน และสามารถแสดงความน่าเชื่อถือในข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ที่สัมพันธ์ระหว่างสารที่สนใจและสารตัวอย่าง”

1.2 ความสำคัญของเคมีวิเคราะห์

ในปัจจุบันเคมีวิเคราะห์เกี่ยวข้องกับศาสตร์ด้านอื่น ๆ อย่างใกล้ชิด ไม่เพียงเฉพาะทางด้านวิทยาศาสตร์เท่านั้น แต่รวมถึงด้านอื่น ๆ ที่จำเป็นต้องค้นหาคำตอบสารที่สนใจไม่ว่าจะเป็นคำตอบเชิงคุณภาพหรือเชิงปริมาณ นักเคมีวิเคราะห์จึงเป็นผู้ที่เกี่ยวข้องกับการดำเนินการตั้งแต่เริ่มต้นจนกระทั่งได้ข้อมูลที่ต้องการ เคมีวิเคราะห์ได้ถูกนำไปประยุกต์ในด้านต่าง ๆ เช่น

- การตรวจวัดระดับน้ำตาลในเลือด เพื่อวินิจฉัยโรคเบาหวาน

- การวิเคราะห์ความเข้มข้นของแก๊สออกซิเจน (O_2) และคาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) ในตัวอย่างเลือด สำหรับการวินิจฉัยและรักษาการเจ็บป่วย
- การวิเคราะห์ปริมาณไนโตรเจนไดออกไซด์ (NO_2) และคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) ที่อยู่ในแก๊สที่ออกจากท่อไอเสียของการเผาไหม้เครื่องยนต์ เพื่อประเมินประสิทธิภาพของอุปกรณ์ควบคุมการปล่อยแก๊ส
- การวิเคราะห์ปริมาณไนโตรเจนในอาหารเสริมบำรุงดินเพื่อประเมินปริมาณโปรตีนทั้งหมดหรือการหาปริมาณธาตุอาหารหลักและธาตุอาหารเสริมในดินเพื่อประเมินความต้องการธาตุอาหารของดินสำหรับการเพาะปลูกพืช
- การวิเคราะห์เหล็กกล้าไม่เป็นสนิม (stainless steel) ระหว่างกระบวนการผลิตเพื่อปรับเปลี่ยนความเข้มข้นของธาตุที่สำคัญเพื่อให้ได้วัสดุสมบัติหรือมีประสิทธิภาพตามที่ต้องการ เช่น ความแข็ง ความเหนียว และทนการกัดกร่อน เป็นต้น
- การวิเคราะห์แคลเซียมในซีรัมเลือด (blood serum) เพื่อทำการวินิจฉัยโรคพาราไทรอยด์ (parathyroid) ในคน
- การวิเคราะห์องค์ประกอบของตัวอย่างทางด้านเภสัชศาสตร์
- การวิเคราะห์สารอาหาร (nutrient) เพื่อประเมินโภชนศาสตร์ในอาหาร หรือการวิเคราะห์สารปนเปื้อนหรือสารพิษตกค้างในอาหารและเครื่องดื่ม เพื่อประเมินความเสี่ยงถึงการได้รับอันตรายจากการบริโภค
- การวิเคราะห์ด้วยสารกระตุ้นสเตียรอยด์ (anabolic-androgenic steroids) หรือที่เรียกว่า ยาโด๊ป (doping in sport) ที่นิยมใช้กับนักกีฬา
- การพัฒนาเทคนิคทางเคมีวิเคราะห์ในการวิเคราะห์เนื้อเยื่อ เซลล์ หรือของเหลวในร่างกายเด็กที่เป็นภาวะโรคคอทิสติก เช่น เทคนิคโครมาโทกราฟีของเหลวสมรรถนะสูง (high performance liquid chromatography; HPLC) เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี (gas chromatography; GC) เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี-แมสสเปกโตรเมตรี (gas chromatography-mass spectrometry; GCMS) และเทคนิคอินดักทีฟพลาสมา-แมสสเปกโตรเมตรี (inductively coupled plasma-mass spectrometry; ICP-MS) เป็นต้น มาใช้ในการวิเคราะห์เนื้อเยื่อหรือของเหลวในร่างกายเด็กที่เป็นภาวะโรคคอทิสติก (Katuzna, Józwick, & Axt, 2014)

จากตัวอย่างข้างต้นเป็นเพียงกรณีตัวอย่างเท่านั้น ซึ่งยังมีการวิเคราะห์อีกจำนวนมากที่เกี่ยวข้องทั้งการดำรงชีวิตประจำวันและการประยุกต์ในด้านต่าง ๆ ซึ่งบทบาทของเคมีวิเคราะห์จึงครอบคลุมและจำเป็นต่อการตรวจวัดประเมิน หรือการควบคุมคุณภาพ (quality control) ที่เกี่ยวข้องกับด้านต่าง ๆ เช่น ด้านเกษตรกรรม ด้านเภสัชกรรม ด้านอาหาร ด้านสิ่งแวดล้อม (น้ำ ดิน อากาศ) ด้านเหมืองแร่ ด้านเครื่องสำอาง และด้านนิติวิทยาศาสตร์ เป็นต้น การเข้าใจว่าเคมีวิเคราะห์เป็นการทดลองแต่ในห้องปฏิบัติการเพียงเท่านั้น อาจไม่ถูกต้องทั้งหมด เนื่องจากการปฏิบัติการและตรวจวิเคราะห์ในห้องทดลองเป็นเพียงขั้นตอนหนึ่งของกระบวนการวิเคราะห์ นักเคมีวิเคราะห์จะต้องดำเนินการวิเคราะห์ให้ครอบคลุมตั้งแต่กำหนดสภาพปัญหาจนกระทั่งหาแนวทางการแสวงหาคำตอบของปัญหานั้น ๆ ตามหลักทางวิทยาศาสตร์อย่างเข้มข้น จนสามารถอธิบายหรือค้นหาคำตอบได้อย่างถูกต้อง ปราศจากความคลาดเคลื่อน หากพิจารณาหน้าที่ที่แท้จริงของนักเคมีวิเคราะห์อาจแบ่งอย่างกว้าง ๆ ได้ดังนี้

1) การดำเนินการวิเคราะห์สารที่สนใจ (analytical procedure) โดยอาศัยความรู้เกี่ยวกับเคมีวิเคราะห์ในด้านต่าง ๆ มาช่วยในการแก้ไขปัญหาตามขั้นตอนการวิเคราะห์ การเลือกวิธีวิเคราะห์ที่ให้ความแม่นยำในระดับที่ต้องการ การชักตัวอย่างที่เหมาะสมและถูกต้อง การเตรียมตัวอย่าง การวัดด้วยเทคนิคที่เหมาะสมสอดคล้องกับวิธีมาตรฐาน และการรายงานผลการวิเคราะห์ที่ต้องแสดงความเชื่อมั่นในความแม่นยำและความเที่ยง นักเคมีวิเคราะห์จึงต้องเข้าใจถึงกระบวนการวิเคราะห์ทางเคมีและจำเป็นต้องเข้าใจถึงเหตุผลที่อยู่เบื้องหลังขั้นตอนต่าง ๆ ที่ทำการทดลอง สามารถบอกได้ว่าขั้นตอนใดมีความสำคัญที่จะส่งผลทำให้ผลการวิเคราะห์ถูกต้อง หรือคลาดเคลื่อน สามารถเลือกใช้เทคนิคที่เหมาะสมสำหรับขั้นตอนต่าง ๆ ของกระบวนการวิเคราะห์

2) การพัฒนาวิธีวิเคราะห์ (developed method) เป็นการแสวงหาองค์ความรู้ใหม่โดยการพัฒนาวิธีวิเคราะห์ที่แตกต่างจากวิธีดั้งเดิม หรือเป็นการปรับปรุงเพื่อแก้ปัญหาหรือเพิ่มสมรรถนะของวิธีที่มีอยู่ก่อน เช่น มีสภาพไวขึ้น มีความแม่นยำมากขึ้น ระยะเวลาวิเคราะห์สั้นลง ค่าใช้จ่ายน้อยลง เป็นต้น การพัฒนาวิธีวิเคราะห์ยังหมายรวมถึงการพัฒนาวิธีการเตรียมตัวอย่างด้วยวิธีหรือเทคนิคใหม่ ๆ อย่างไรก็ตาม การพัฒนาวิธีวิเคราะห์จะต้องเปรียบเทียบกับวิธีวิเคราะห์มาตรฐาน (standard method) หรือต้องตรวจสอบความใช้ได้ของวิธี (method validation) ที่พัฒนาขึ้น

1.3 การจำแนกการวิเคราะห์ทางเคมี

การวิเคราะห์ทางเคมีสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 ชนิดอย่างกว้าง ๆ ดังนี้

1) การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ (qualitative analysis) คือ การวิเคราะห์ที่สนใจทราบข้อมูลเกี่ยวกับตัวอย่างว่ามีองค์ประกอบใด มีสารที่สนใจรวมอยู่หรือไม่ เป็นสารบริสุทธิ์หรือสารประกอบ เช่น ต้องการทราบว่าในตัวอย่างผงสีขาวเป็นเกลือแกงหรือไม่ จึงต้องทดสอบเพื่อยืนยันโดยอาศัยสมบัติทางกายภาพหรือทางเคมี เช่น ทดสอบการละลาย ทดสอบโดยเปลวไฟ เป็นต้น คำตอบของการวิเคราะห์เชิงคุณภาพจะระบุเป็นเพียงใช่หรือไม่ใช่ มีหรือไม่มี แต่ไม่ได้บ่งบอกถึงระดับปริมาณของสารที่สนใจ

2) การวิเคราะห์เชิงปริมาณ (quantitative analysis) คือ การวิเคราะห์ที่ต้องการทราบระดับปริมาณของสารที่สนใจในสารตัวอย่าง เช่น ต้องการทราบปริมาณของแข็งทั้งหมด (total solid) ในตัวอย่างน้ำ ต้องการทราบปริมาณแร่ธาตุไนโตรเจน (N) ฟอสฟอรัส (P) และโพแทสเซียม (K) ในดินหรือปุ๋ย ต้องการทราบปริมาณสารหนู (As) ในข้าว ต้องการทราบปริมาณออกซิเจนละลาย (dissolved oxygen; DO) ในน้ำทิ้งหรือแหล่งน้ำธรรมชาติ เป็นต้น การหาคำตอบจะต้องทำการทดลองตามขั้นตอนการวิเคราะห์อย่างเป็นระบบเพื่อให้ได้คำตอบเป็นปริมาณสารที่สนใจในสารตัวอย่างอย่างถูกต้อง และต้องมีความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุดเท่าที่จะทำได้

อย่างไรก็ตาม การวิเคราะห์สารที่สนใจในสารตัวอย่างหนึ่ง ๆ อาจจำเป็นต้องดำเนินการทั้งที่เป็นการวิเคราะห์เชิงคุณภาพและการวิเคราะห์เชิงปริมาณควบคู่กัน โดยการวิเคราะห์เชิงคุณภาพจะเป็นการประเมินเบื้องต้นเกี่ยวกับการมีอยู่ของสารที่สนใจก่อนจะทำการวิเคราะห์เชิงปริมาณ แต่โดยส่วนใหญ่ในการวิเคราะห์ทางเคมีวิเคราะห์มักจำเป็นต้องหาคำตอบที่เป็นปริมาณสารที่สนใจในสารตัวอย่างถึงกระนั้นไม่ได้หมายความว่า การวิเคราะห์เชิงคุณภาพจะสามารถทำได้ง่ายกว่าการวิเคราะห์เชิงปริมาณ และในบางกรณีอาจทำได้ยากกว่าเสียอีก เช่น การที่จะระบุว่าคุณภาพน้ำตัวอย่างจัดเป็นน้ำเสียหรือไม่ เนื่องจากต้องทำการวิเคราะห์ตามดัชนีที่ใช้เป็นเกณฑ์บอกระดับคุณภาพน้ำจึงจะสามารถระบุได้ว่าเป็น

น้ำเสียหรือไม่เป็นน้ำเสีย หรือการทดสอบว่าสารที่สงสัยเป็นสารใดนั้นอาจจำเป็นต้องอาศัยเทคนิคและวิธีการตรวจสอบหลายวิธีจึงจะสามารถตอบได้ ซึ่งต่างกับการวิเคราะห์เชิงปริมาณที่ดำเนินการวิเคราะห์เพื่อบ่งชี้ระดับความเข้มข้นของสารที่สนใจเท่านั้น

1.4 ศัพท์ทางเคมีวิเคราะห์

คำศัพท์เฉพาะที่นิยมใช้ในการบ่งชี้ถึงข้อมูลของการวัดทางเคมีวิเคราะห์ (analytical measurement) ได้แก่ การวิเคราะห์ (analysis) การหาปริมาณ (determination) และการพิสูจน์เอกลักษณ์ (characterization) ซึ่งในบางครั้งอาจพบเห็นว่ามีการใช้คำศัพท์เดียวกันในลักษณะงานต่างกันหรือลักษณะงานอย่างเดียวกันแต่อาจใช้คำศัพท์ต่างกันก็มี ความหมายอาจพิจารณาอย่างกว้าง ๆ ได้ดังนี้

- การวิเคราะห์ เป็นคำที่มีความหมายกว้างเพื่ออธิบายถึงกระบวนการหนึ่ง ๆ ที่ทำให้ได้ข้อมูลทางเคมีหรือทางกายภาพขององค์ประกอบภายในสารตัวอย่าง โดยองค์ประกอบที่เป็นที่สนใจให้ได้ข้อมูล เรียกว่า สารที่สนใจ (analyte) ส่วนองค์ประกอบอื่น ๆ ทั้งหมดในสารตัวอย่างที่ไม่ได้เป็นสารที่สนใจวิเคราะห์ เรียกว่า ตัวกลาง (เมทริกซ์, matrix) ดังนั้น การวิเคราะห์จึงมีความหมายรวมทั้งการหาลักษณะเฉพาะ (identification) การหาความเข้มข้น หรือสมบัติเฉพาะ (property) ของสารที่สนใจทั้งเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ
- การหาปริมาณ เป็นคำศัพท์ที่นิยมใช้เพื่อบอกถึงกระบวนการวัดสารที่สนใจที่เป็น การวิเคราะห์เชิงปริมาณ
- การพิสูจน์เอกลักษณ์ เป็นการทดลองเพื่ออธิบายสมบัติอย่างใดอย่างหนึ่งของสารที่สนใจ อาจหมายรวมถึงการหาลักษณะเฉพาะด้วย

ดังนั้น หากพิจารณาคำศัพท์ทั้งสามคำจะเห็นว่าอาจมีความหมายที่ใกล้เคียงกัน หรืออาจใช้แทนกันได้บางกรณี การศึกษาทางเคมีวิเคราะห์จะมีคำศัพท์ที่สำคัญที่จำเป็นต้องทราบและทำความเข้าใจ เพื่อให้สามารถอ่านบทความวิจัยได้อย่างเข้าใจ เช่น

- สารที่สนใจ (หรือเรียกทับศัพท์ว่า แอแนไลซ์) คือ ชนิดของสารที่สนใจวิเคราะห์ ชนิดของสารที่สนใจหาปริมาณ หรือชนิดของสารที่สนใจพิสูจน์เอกลักษณ์
- สารตัวอย่าง หรือตัวอย่าง (sample) คือ ชนิดหรือประเภทของตัวอย่างที่จะต้อง การวิเคราะห์หาสารที่สนใจทั้งเชิงคุณภาพหรือเชิงปริมาณ
- การชักตัวอย่าง (sampling) คือ ขั้นตอนหรือวิธีดำเนินการเก็บสารตัวอย่างจากพื้นที่หรือบริเวณหนึ่ง ๆ ตามที่กำหนด รวมทั้งวิธีการเก็บรักษาตัวอย่างก่อนกระบวนการเตรียมตัวอย่าง และการวิเคราะห์
- การเตรียมตัวอย่าง (sample preparation) คือ ขั้นตอนหรือวิธีการเตรียมตัวอย่าง หรือสารตัวอย่างให้อยู่ในรูปที่สามารถวิเคราะห์สารที่สนใจได้ด้วยวิธีการที่เหมาะสม เช่น การบดละเอียด การละลาย การกรอง การย่อยโดยใช้กรด การฟลักซ์ด้วยเบส การเผาให้เป็นเถ้า เป็นต้น
- วิธี หรือวิธีการ (method) คือ วิธีการวิเคราะห์สารที่สนใจในสารตัวอย่าง ซึ่งในสารตัวอย่างแต่ละชนิดมีตัวกลางที่ไม่เหมือนกัน

- ตัวกลาง (หรือเรียกทับศัพท์ว่า แมทริกซ์, matrix) คือ องค์ประกอบทุกส่วนที่มีอยู่ในสารตัวอย่างที่ไม่ใช่สารที่สนใจ โดยบางองค์ประกอบเหล่านั้นอาจเป็นตัวรบกวนการวิเคราะห์ที่ส่งผลต่อการวิเคราะห์สารที่สนใจคลาดเคลื่อนได้

- วิธีมาตรฐาน (standard method) คือ วิธีการวิเคราะห์ที่ได้รับการยอมรับจากสถาบัน หรือหน่วยงานที่เกี่ยวข้อง เพื่อกำหนดให้เป็นวิธีมาตรฐานของการวิเคราะห์สารที่สนใจในชนิดหรือประเภทของสารตัวอย่างหนึ่ง ๆ เช่น Association of Official Analytical Chemists (AOAC), United States Environmental Protection Agency (USEPA) และ American Society for Testing and Materials (ASTM) เป็นต้น

- แบลงก์ (blank) คือ องค์ประกอบของสารตัวอย่างในระบบการวิเคราะห์ที่ต้องไม่มีสารที่สนใจ หรือองค์ประกอบทั้งหมดของสารละลายที่ใช้ในการวัดแต่ในองค์ประกอบทั้งหมดนั้นไม่มีสารที่สนใจอยู่ด้วย

- การวิเคราะห์แบลงก์ (blank analysis) คือ การนำแบลงก์มาทำการวิเคราะห์ตามวิธีเดียวกับสารตัวอย่าง เพื่อทดสอบการรบกวนของตัวกลาง หรือเพื่อติดตามสัญญาณตอบสนองของเครื่องมือวัด

- พารามิเตอร์ (parameter) หรือ ดัชนี คือ คำศัพท์ที่นิยามใช้อย่างกว้าง ๆ เพื่อบ่งชี้ถึงการปฏิบัติงานอย่างหนึ่งอย่างใดในการทดลอง เช่น บ่งชี้ชนิดสารที่สนใจ หรือบ่งชี้ถึงสถานะหนึ่งในการทดลอง หรือตัวแปรที่ต้องการศึกษา เป็นต้น

- การสอบเทียบ (calibration) คือ วิธีการเทียบมาตรฐานเครื่องมือวัด อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ และอุปกรณ์ชั่ง ตวง วัด เป็นต้น

- ความแม่นยำ (accuracy) หรือที่นิยมเรียกอีกอย่างว่า ความถูกต้อง คือ ค่าที่แสดงความใกล้เคียงระหว่างค่าที่วัดได้จากการทดลองกับค่าแท้จริง

- ความเที่ยง (precision) คือ ค่าที่บ่งบอกถึงการเปลี่ยนแปลงในการวัดซ้ำหลาย ๆ ครั้ง (replicate measurements)

- สถานะทำซ้ำได้ (repeatability) คือ การประเมินความเที่ยงโดยการวัดซ้ำหลาย ๆ ครั้ง (replicate measurements)

- สถานะทวนซ้ำได้ (reproducibility) คือ การประเมินความเที่ยงโดยทำการวัดซ้ำหลาย ๆ ครั้ง ที่สถานะการทดลอง เช่น ผู้ทดลอง เครื่องมือ หรือห้องทดลองเปลี่ยนแปลงไป

- สภาพคัดเลือก (selectivity) คือ ความสามารถของวิธีวิเคราะห์ที่จะวิเคราะห์เฉพาะสารที่สนใจโดยไม่ถูกรบกวนจากแบลงก์ หรือวิธีการวิเคราะห์ที่มีความสามารถในการเลือกวัดเฉพาะสารที่ต้องการจะวัด

- สภาพจำเพาะ (specificity) คือ ความสามารถของวิธีในการวิเคราะห์เฉพาะสารที่สนใจเท่านั้น หรือสามารถจำแนกสารที่สนใจออกจากสารอื่น ๆ ในระบบ โดยสารอื่น และ/หรือ ตัวกลางไม่มีผลรบกวนการวิเคราะห์

- สภาพไว (sensitivity) คือ ความสามารถในการวัดความเข้มข้นที่แตกต่างกันน้อยที่สุด วิธีการวิเคราะห์ที่มีความไวสูงจะสามารถตรวจวิเคราะห์สารในปริมาณน้อยมากหรือเป็นวิธีที่สามารถแยกความเข้มข้นของสารที่แตกต่างกันน้อยมากได้ถูกต้อง

- ความสัมพันธ์เชิงเส้นตรง (linearity) หรือช่วงความเป็นเส้นตรง (linear range) คือ ความสามารถของวิธีที่จะทำให้วิเคราะห์แล้วได้ผลการวิเคราะห์ที่เป็นสัดส่วนกับความเข้มข้นของสารที่สนใจในช่วงความเข้มข้นที่กำหนด

- ความคงทน (robustness) คือ ความคงทนของวิธีวิเคราะห์ช่วงระยะหนึ่ง ๆ ที่แม้ว่าจะมีการเปลี่ยนแปลงระบบเพียงเล็กน้อย ผลการทดสอบที่มีความคลาดเคลื่อนเพียงเล็กน้อย หรืออาจจะไม่มีผลกระทบต่อผลการวิเคราะห์อย่างมีนัยสำคัญ

- ขีดจำกัดในการตรวจวัด (detection limit หรือ limit of detection; LOD) คือ ปริมาณต่ำสุดของสารที่สนใจในตัวอย่างใด ๆ ที่สามารถตรวจวัดได้ แต่ไม่จำเป็นต้องทราบว่ามีความเข้มข้นที่แน่นอนเท่าใด ในบางตำรา หรือบทความวิจัย ขีดจำกัดในการตรวจวัด อาจใช้คำว่า ปริมาณน้อยสุดที่วัดได้ (minimum detectable value) โดยทั่วไป ขีดจำกัดในการตรวจวัดจะเป็นระดับความเข้มข้นของสารที่สนใจที่ให้สัญญาณเท่ากับค่าที่วัดได้จากแบล็กกรัฟร่วมกับ 3 เท่าของค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัญญาณแบล็กกรัฟ

- ขีดจำกัดในการวัดเชิงปริมาณ (quantitation limit หรือ limit of quantitation; LOQ) คือ ปริมาณต่ำสุดของสารที่สนใจในตัวอย่างที่สามารถตรวจหาเชิงปริมาณโดยมีความแม่นยำและความเที่ยงอยู่ในเกณฑ์ที่เหมาะสม โดยทั่วไป ขีดจำกัดในการวัดเชิงปริมาณจะเป็นระดับความเข้มข้นของสารที่สนใจที่ให้สัญญาณเท่ากับค่าที่วัดได้จากแบล็กกรัฟร่วมกับ 10 เท่าของค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัญญาณแบล็กกรัฟ

1.5 การแบ่งวิธีวิเคราะห์

เทคนิคในการวิเคราะห์ คือ หลักการพื้นฐานทางวิทยาศาสตร์ของวิธีการในการวัดสารที่สนใจในสารตัวอย่างเพื่อให้ได้ข้อมูลเชิงคุณภาพหรือเชิงปริมาณ แบ่งออกได้เป็น 2 ประเภท ดังนี้

1) การวิเคราะห์แบบแผนเดิม (classical method) คือ การวิเคราะห์ที่อาศัยเทคนิคพื้นฐานทางการวัดโดยอาจไม่ต้องใช้เครื่องมือที่ซับซ้อนมากนัก ได้แก่

- การวิเคราะห์โดยน้ำหนัก (gravimetric method) ซึ่งเป็นวิธีวิเคราะห์โดยอาศัยความสัมพันธ์ระหว่างน้ำหนักสารที่สนใจกับสารตัวอย่าง โดยอาศัยการเกิดตะกอนที่ละลายน้ำได้น้อยระหว่างสารที่สนใจกับตัวตกตะกอน โดยน้ำหนักตะกอนที่เกิดขึ้นหรือตะกอนที่ทำให้บริสุทธิ์จะสัมพันธ์กับสารตัวอย่างตามปริมาณสัมพันธ์ เช่น การวิเคราะห์แบเรียม (Ba^{2+}) โดยตกตะกอนเป็น BaSO_4 ดังสมการ $\text{Ba}^{2+}(\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq}) \rightarrow \text{BaSO}_4(\text{s})$

- ปริมาตรวิเคราะห์ (volumetric method) ซึ่งเป็นวิธีวิเคราะห์ที่อาศัยการเกิดปฏิกิริยาสมมูลกันระหว่างสารที่สนใจกับสารละลายมาตรฐานตามปริมาณสัมพันธ์ โดยวิธีที่นิยมใช้คือ การไทเทรต (titration) จึงอาจเรียกอีกชื่อว่า ไททริเมตรี (titrimetry) เช่น การวิเคราะห์หาปริมาณร้อยละกรดแอสติก (CH_3COOH) ในตัวอย่างน้ำส้มสายชูกลั่น โดยการไทเทรตกับสารละลายโซเดียมไฮดรอกไซด์ (NaOH) ที่ทราบความเข้มข้นแน่นอนโดยใช้ฟีนอล์ฟทาลีนเป็นอินดิเคเตอร์ เรียกจุดที่อินดิเคเตอร์เปลี่ยนสีว่า จุดยุติ (end point) ซึ่งปริมาตรของสารละลาย NaOH ที่ใช้ในการไทเทรตสามารถใช้คำนวณน้ำหนักของกรดแอสติกโดยอาศัยปริมาณสัมพันธ์ได้

2) การวิเคราะห์แบบแผนใหม่ (modern method) คือ การวิเคราะห์ที่อาศัยหลักพื้นฐานทางเคมี และการพัฒนาการวัดด้วยเครื่องมือวิเคราะห์ หรือที่เรียกว่า วิธีวิเคราะห์โดยเครื่องมือวิเคราะห์ (instrumental method) ซึ่งวิธีนี้อาศัยการวัดสมบัติทางกายภาพ และ/หรือ สมบัติทางเคมีของสารที่สนใจ หรือการวัดสัญญาณตอบสนองอันเนื่องมาจากการเปลี่ยนแปลงอย่างหนึ่งอย่างใดที่เกิดขึ้นระหว่างการวัด ซึ่งสัญญาณตอบสนองที่เกิดขึ้นสัมพันธ์กับปริมาณของสารที่สนใจในสารตัวอย่าง การวิเคราะห์แบบแผนใหม่อาจแบ่งได้ตามลักษณะเฉพาะ ได้แก่

2.1) เทคนิคการวิเคราะห์ทางเคมีไฟฟ้า (electrochemical techniques) เป็นวิธีวิเคราะห์โดยการวัดสมบัติทางไฟฟ้าที่สัมพันธ์กับชนิดหรือปริมาณสารที่สนใจ เช่น

- เทคนิคโพเทนชิโอเมตรี (potentiometry) เป็นเทคนิคการวัดค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าซึ่งสัมพันธ์กับความว่องไว (activity) ของไอออนตามสมการเนินสต์
- เทคนิคคอนดักโตเมตรี (conductometry) เป็นเทคนิคการวัดค่าการนำไฟฟ้าของสารละลาย

- เทคนิคแอมเพอโรเมตรี (amperometry) เป็นเทคนิคที่ให้ศักย์ไฟฟ้าที่คงที่กับขั้วไฟฟ้าใช้งานที่เพียงพอในการทำให้เกิดปฏิกิริยาของสารตัวอย่างที่ผิวหน้าของขั้วไฟฟ้าได้ แล้ววัดค่ากระแสไฟฟ้าที่เกิดขึ้นที่สัมพันธ์กับเวลา ซึ่งค่ากระแสไฟฟ้าที่วัดได้จะแปรผันโดยตรงกับความเข้มข้นของสารที่เกิดปฏิกิริยา

- เทคนิคคูลอมเมตรี (coulometry) เป็นการวัดปริมาณประจุไฟฟ้าทั้งหมดที่ใช้ทำให้สารตัวอย่างเกิดปฏิกิริยารีดอกซ์อย่างสมบูรณ์ โดยอาศัยความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณประจุไฟฟ้ากับจำนวนกรัมสมมูลของสารนั้นตามกฎฟาราเดย์

- เทคนิคโวลแทมเมตรี (voltammetry) เป็นเทคนิควิเคราะห์ที่ให้ศักย์ไฟฟ้าแก่วงจร เพื่อให้เกิดปฏิกิริยาเคมีของสารตัวอย่าง การจัดเซลล์ของวงจรเป็นแบบเซลล์อิเล็กโทรไลต์และการไหลของกระแสอยู่ภายใต้สภาวะการเกิดโพลาริเซชันที่ขั้วไฟฟ้า แล้ววัดกระแสไฟฟ้าที่เกิดขึ้น ณ ศักย์ไฟฟ้าต่าง ๆ ที่ให้แก่วงจร

2.2) เทคนิคทางสเปกโทรเมตรี (spectrometric techniques) หรือที่เรียกว่า วิธีทางแสง (optical method) ซึ่งอาศัยหลักการเกิดอันตรกิริยา (interaction) ระหว่างสสารของอนุภาคนิวเคลียสที่สนใจกับรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า โดยอันตรกิริยาที่เกิดขึ้นจะเป็นสมบัติเฉพาะของสสารกับพลังงานของรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า เช่น

- การดูดกลืน (absorption) เป็นวิธีวิเคราะห์ที่อาศัยหลักการดูดกลืนรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าของสสาร เช่น วิธียูวี-วิสิเบิลสเปกโทรเมตรี (UV-visible spectrometry; UV-vis) วิธีอะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรเมตรี (atomic absorption spectrometry; AAS) วิธีอินฟราเรดสเปกโทรเมตรี (infrared spectrometry; IR) วิธีรามานสเปกโทรเมตรี (Raman spectrometry) วิธีนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ (nuclear magnetic resonance; NMR) เป็นต้น

- การเปล่งออก (emission) เป็นวิธีวิเคราะห์ที่อาศัยหลักการเปล่งพลังงานออกมา เมื่ออนุภาคนิวเคลียสที่สนใจเกิดอันตรกิริยากับรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า เช่น เทคนิคอะตอมมิกอิมิสชันสเปกโทรเมตรี (atomic emission spectrometry; AES) เทคนิคอินดักทีฟลีคัปเปิลด์พลาสมาออปติคอลลอิมิสชันสเปกโทรเมตรี (inductively coupled plasma optical emission

spectrometry; ICP-OES) เทคนิคเอกซเรย์ฟลูออเรสเซนส์สเปกโทรเมตรี (X-ray fluorescence; XRF) และเทคนิคลูมิเนสเซนส์สเปกโทรเมตรี (luminescence spectrometry) เป็นต้น

- การกระเจิงแสง (scattering) เป็นการวัดการกระเจิงแสงของสาร เช่น วิธีเทอบิดิเมตรี (turbidimetry)
- การหักเหของรังสี (refraction) ใช้หลักการหักเหเมื่อรังสีผ่านตัวกลางที่มีความหนาแน่นต่างกัน เช่น เทคนิครีแฟรกโตเมตรี (refractometry)
- การเลี้ยวเบนของรังสี (diffraction) อาศัยหลักการเลี้ยวเบนของรังสีเมื่อกระทบกับตัวอย่าง เช่น การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ของเทคนิคเอกซเรย์ดิฟแฟรกโตเมตรี (X-ray diffractometry) เป็นต้น

2.3) เทคนิคที่เกี่ยวข้องกับการแยก (separation techniques) โดยส่วนใหญ่จะอาศัยวิธีโครมาโทกราฟี (chromatography) เป็นหลัก โดยอาศัยหลักการแยกสารที่สนใจออกจากสารตัวอย่าง อันเนื่องมาจากสารมีปฏิกิริยากับสองวัฏภาค (phase) ที่ไม่เป็นเนื้อเดียวกัน เช่น ระหว่างวัฏภาคของแข็งกับของเหลว (solid/liquid) ของเหลวกับของเหลว (liquid/liquid) และของเหลวกับแก๊ส (liquid/gas) ตัวอย่างวิธีวิเคราะห์ เช่น

- เทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี (GC) เป็นเทคนิคที่ใช้สำหรับแยกสารตัวอย่างที่เป็นสารผสมที่สามารถระเหยเป็นไอได้ โดยไอระเหยที่เกิดขึ้นจะถูกนำเข้าสู่คอลัมน์โดยอาศัยการพาของวัฏภาคเคลื่อนที่ (mobile phase) ที่เป็นแก๊ส และไอสารตัวอย่างถูกแยกด้วยวัฏภาคคงที่ (stationary phase) ในคอลัมน์ โดยสารตัวอย่างจะถูกแยกเป็นส่วนในคอลัมน์ ตามสมบัติทางเคมี โครงสร้าง น้ำหนักโมเลกุล จุดเดือด เป็นต้น

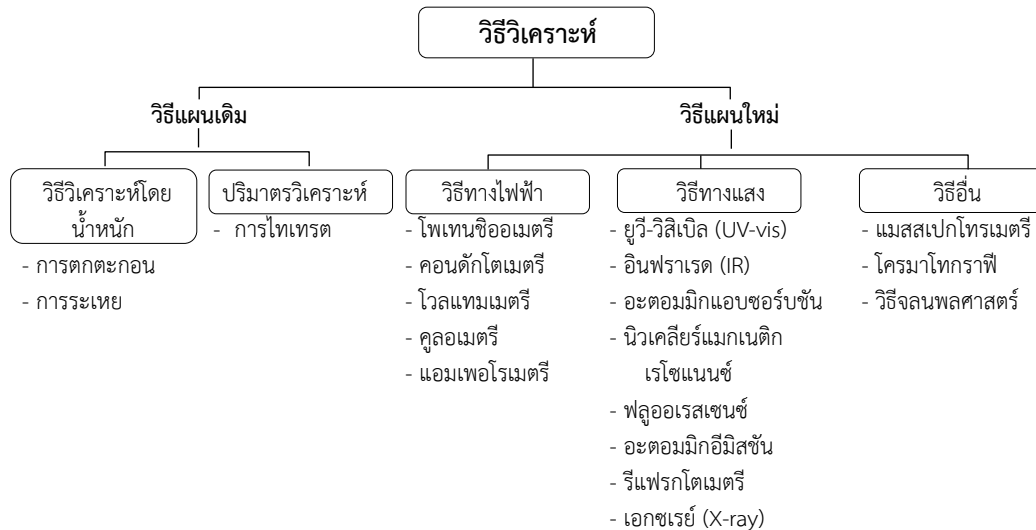
- เทคนิคโครมาโทกราฟีของเหลว (LC) เป็นเทคนิคที่ใช้สำหรับแยกสารตัวอย่างที่เป็นสารผสมโดยอาศัยการพาของวัฏภาคเคลื่อนที่ที่เป็นของเหลว และสารตัวอย่างถูกแยกด้วยวัฏภาคคงที่ในคอลัมน์ที่เป็นของแข็ง หรือของเหลว

- เทคนิคไอออนโครมาโทกราฟี (ion chromatography; IC) เป็นเทคนิคที่ใช้แยกแคตไอออนหรือแอนไอออน โดยอาศัยการแลกเปลี่ยนไอออน (ion exchange) ที่เกิดจากการดักจับไอออนที่มีประจุตรงกันข้ามกับวัฏภาคคงที่ที่อยู่ภายในคอลัมน์ ซึ่งเป็นแรงยึดเหนี่ยวระหว่างประจุที่แตกต่างกัน

2.4) เทคนิคเกี่ยวข้องกับความร้อน (thermal analytical techniques) เป็นวิธีที่อาศัยการเปลี่ยนแปลงทางเคมี หรือทางกายภาพ เมื่อสารได้รับความร้อน เช่น วิธีวิเคราะห์โดยน้ำหนักด้วยความร้อน (thermogravimetric analysis; TGA) ซึ่งเป็นการวัดมวลที่เปลี่ยนแปลงเมื่อสารได้รับความร้อนที่ระดับอุณหภูมิแตกต่างกัน

2.5) เทคนิคเกี่ยวกับการวิเคราะห์มวล (mass analysis) เช่น เทคนิคแมสสเปกโทรสโกปี (mass spectroscopy) เป็นวิธีวิเคราะห์โดยอาศัยค่ามวลต่อประจุของไอออนที่เกิดการแตกตัวเป็นไอออนย่อย (fragment ion)

2.6) วิธีวิเคราะห์ทางจลนพลศาสตร์ (kinetic method) เป็นวิธีการวิเคราะห์อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี การหาอันดับของปฏิกิริยา รวมทั้งศึกษาปัจจัยต่าง ๆ ที่มีผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีด้วย และนำมาใช้ตรวจสอบความเข้มข้นของสารที่สนใจ



ภาพที่ 1.1 การแบ่งประเภทของเทคนิคการวิเคราะห์ทางเคมีวิเคราะห์

หากมีคำถามว่าผู้ทดลองจะต้องดำเนินการอย่างไรเกี่ยวกับการวิธีวิเคราะห์ตะกั่วในน้ำดื่ม ซึ่งระดับของการให้ไดมาของคำตอบดังกล่าวประกอบด้วย 4 ระดับด้วยกัน คือ เทคนิค วิธี ขั้นตอน ปฏิบัติงาน และขั้นตอนบังคับใช้

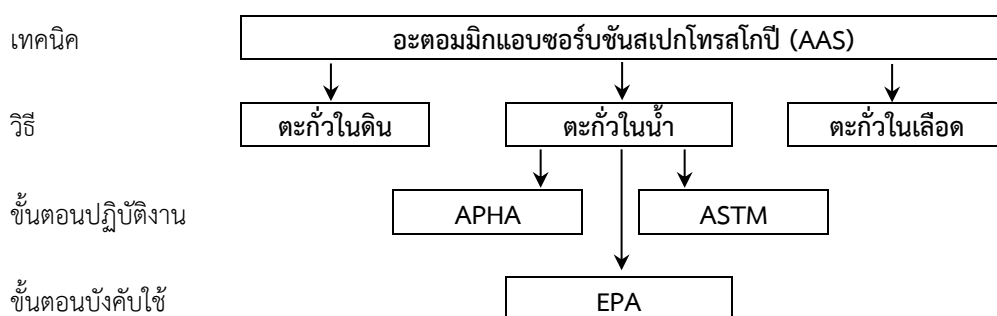
- เทคนิค (technique) คือ หลักการทางวิทยาศาสตร์ (ทางเคมีหรือทางกายภาพ) ที่ใช้ในการศึกษาสารที่สนใจ ซึ่งการวิเคราะห์หาปริมาณตะกั่วในน้ำดื่มอาจมีได้หลายหลักการด้วยกัน เช่น หลักการทางเคมีไฟฟ้า สเปกโทรสโกปี การตกตะกอน การไทเทรต เป็นต้น ในตัวอย่างนี้เลือกหลักการทางสเปกโทรสโกปี คือ เทคนิคอะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรสโกปี (AAS) ซึ่งเป็นเทคนิคการวิเคราะห์โดยเริ่มต้นด้วยขั้นตอนเปลี่ยนไอออนตะกั่วในสารละลายให้เป็นอะตอมอิสระ (free atom) เรียกขั้นตอนนี้ว่า อะตอมไมเซชัน (atomization) และทำการวัดปริมาณแสงที่ถูกดูดกลืนไปโดยอะตอมอิสระ ดังนั้น อะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรสโกปี จึงใช้ทั้งหลักการทางสเปกโทรสโกปี คือการเกิดเป็นอะตอมอิสระ และหลักการดูดกลืนคลื่นรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าของสสาร (matter)

- วิธี (method) คือ การประยุกต์เทคนิคมาใช้ในการวิเคราะห์สารที่สนใจที่อยู่ในตัวกลางที่ไม่เหมือนกัน กล่าวคือ ในตัวอย่างแต่ละประเภทจะมีสภาพองค์ประกอบของตัวอย่างที่แตกต่างกัน เช่น วิธีอะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรเมตรีสำหรับการวิเคราะห์ตะกั่วในน้ำดื่มจะแตกต่างจากการวิเคราะห์ในตัวอย่างดิน หรือตัวอย่างเลือด แม้ว่าจะใช้เทคนิคเดียวกันก็ตาม เนื่องจากตัวอย่างแต่ละประเภทมีตัวกลางที่แตกต่างกัน

- ขั้นตอนปฏิบัติงาน (procedure) คือ เอกสารที่แสดงลำดับขั้นที่ใช้ระบุว่าวิธีวิเคราะห์นั้นมีขั้นตอนดำเนินการอย่างไรกับตัวอย่าง รวมถึงการชักตัวอย่าง การกำจัดตัวรบกวน และการทดสอบความน่าเชื่อถือ ในวิธีวิเคราะห์หนึ่ง ๆ จะมีขั้นตอนที่แตกต่างกันตามวิธีการวิเคราะห์ที่หน่วยงาน/องค์กร/สถาบันที่ได้รับความเชื่อถือกำหนด เช่น American Public Health Agency (APHA) และ American Society for Testing Materials (ASTM) ต่างกำหนดขั้นตอนการวิเคราะห์ตะกั่วในน้ำดื่มไว้แตกต่างกัน

- ขั้นตอนบังคับใช้ หรือโปรโตคอล (protocol) คือ เอกสารที่เขียนขึ้นเพื่อระบุขั้นตอนการวิเคราะห์อย่างเคร่งครัดโดยองค์กรหรือหน่วยงานที่เป็นที่ยอมรับ และผู้วิเคราะห์ต้องปฏิบัติตามในการใช้วิธีวิเคราะห์นั้น ๆ เอกสารนี้มีจุดประสงค์เพื่อให้ผู้ปฏิบัติหรือห้องปฏิบัติการสามารถนำไปอ้างอิงได้ เช่น การวิเคราะห์ตะกั่วในน้ำดื่มภายใต้บังคับของ Safe Drinking Water Act (SDWA) โดยการทำงานของผู้ทดลองและห้องปฏิบัติการต้องใช้ขั้นตอนบังคับใช้ที่ Environmental Protection Agency (EPA) กำหนด

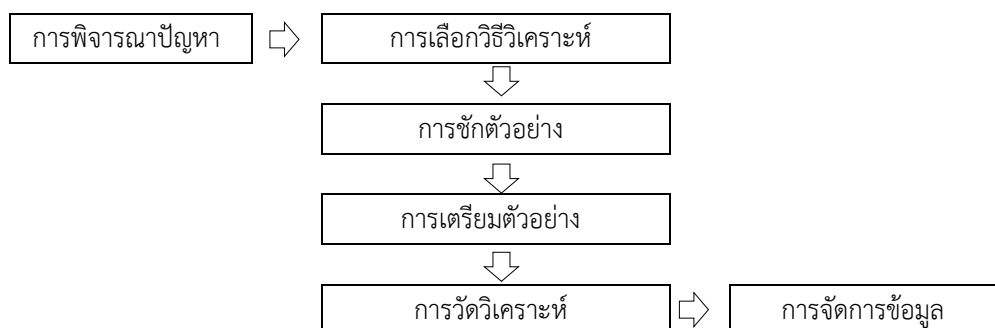
ภาพที่ 1.2 แสดงระดับของการวิเคราะห์ตะกั่วในน้ำดื่ม โดยมีระดับที่เป็นขั้นตอนบังคับใช้ตาม EPA มีขั้นตอนปฏิบัติงานที่ได้รับการตรวจสอบความใช้ได้ มีวิธีการวิเคราะห์ตะกั่วในตัวอย่างที่มีตัวกลางหรือองค์ประกอบทั้งหมดเป็นน้ำดื่ม โดยเทคนิคการวิเคราะห์หาค่าหลักการดูดกลืนแสงของอะตอมอิสระของธาตุ



ภาพที่ 1.2 ระดับของเทคนิค วิธี ขั้นตอนปฏิบัติงาน และขั้นตอนบังคับใช้

1.6 ขั้นตอนในการวิเคราะห์

การดำเนินการวิเคราะห์สารที่สนใจใด ๆ ในตัวอย่าง ผู้วิเคราะห์ต้องคิดเสมอว่าไม่ทราบค่าแท้จริงของสารที่สนใจในตัวอย่างนั้น ๆ ดังนั้น การวิเคราะห์เชิงปริมาณทางเคมีวิเคราะห์จำเป็นต้องดำเนินการตามลำดับขั้นตอน ดังภาพที่ 1.3 เพื่อให้ได้คำตอบเป็นค่าที่แท้จริงหรือใกล้เคียงกับค่าแท้จริงมากที่สุด ขั้นตอนของกระบวนการวิเคราะห์ทางเคมีวิเคราะห์มีหลายขั้นตอน และแต่ละขั้นตอนล้วนมีความสำคัญต่อผลการวิเคราะห์ทั้งสิ้น



ภาพที่ 1.3 สรุปขั้นตอนการวิเคราะห์

ขั้นตอนที่ 1 การพิจารณาปัญหา (problematic consideration)

การกำหนดปัญหาและขอบเขตให้ตรงตามวัตถุประสงค์ของการวิเคราะห์เพื่อเลือกใช้ขั้นตอนการวิเคราะห์ลำดับถัดไปอย่างถูกต้อง การพิจารณาปัญหาในการวิเคราะห์ขึ้นกับวัตถุประสงค์ของผู้ทำการทดลอง เช่น

- 1) ปัญหาคืออะไร และคำตอบที่ต้องการคืออะไร
- 2) คำตอบที่ต้องการเป็นเชิงคุณภาพหรือเชิงปริมาณ
- 3) ข้อมูลที่ได้จะบอกเกี่ยวกับอะไร หรือจะนำข้อมูลไปใช้ทำอะไร
- 4) ส่วนประกอบของสารตัวอย่างและสารที่สนใจวิเคราะห์อยู่ในรูปทางเคมี (chemical form) แบบใด
- 5) ผลการวิเคราะห์ต้องการความแม่นยำและความเที่ยงมากน้อยเพียงใด
- 6) ปัจจัยของตัวอย่าง เช่น ชนิด สถานะ ปริมาณ สมบัติทางเคมีและกายภาพ และปัจจัยสารที่สนใจ เช่น รูปทางเคมี ระดับความเข้มข้น สมบัติทางเคมีอื่น ๆ และตัวกลาง
- 7) ค่าใช้จ่าย และเวลา

ดังนั้น ขั้นตอนการพิจารณาปัญหา จะต้องกำหนดของชนิดสารที่สนใจและชนิดตัวอย่างให้ชัดเจน เพื่อให้ดำเนินการขั้นตอนต่อไปได้อย่างถูกต้อง และควรกำหนดขอบเขตการทดลองในปัจจัยที่เกี่ยวข้องให้ชัดเจนด้วย ทั้งนี้ขั้นตอนการพิจารณาปัญหาอาจไม่ต้องดำเนินการ ในกรณีที่ผู้วิเคราะห์ทำการทดสอบสารที่สนใจในตัวอย่างที่ระบุอย่างชัดเจนแล้วจากผู้ส่งตัวอย่างให้วิเคราะห์

ขั้นตอนที่ 2 การเลือกวิธีวิเคราะห์ (method selection)

เนื่องจากวิธีการวิเคราะห์เป็นการประยุกต์ใช้เทคนิคหนึ่ง ๆ มาดำเนินการวิเคราะห์สารที่สนใจในตัวอย่างที่มีตัวกลางหนึ่ง ๆ ดังนั้น การเลือกวิธีวิเคราะห์ต้องสอดคล้องกับชนิดสารที่สนใจและชนิดตัวอย่าง เพราะวิธีการวิเคราะห์สารที่สนใจชนิดเดียวกันสามารถเลือกใช้เทคนิควิเคราะห์ได้หลายเทคนิค การเลือกวิธีวิเคราะห์จึงมีได้หลายวิธี ซึ่งปัจจัยระดับความต้องการในขั้นพิจารณาปัญหาจะเป็นปัจจัยกำหนดให้เลือกรูปวิธีวิเคราะห์ที่ดีที่สุดและเหมาะสมที่สุด ในการเลือกรูปวิธีวิเคราะห์ที่เหมาะสมอาจต้องพิจารณาปัจจัยดังนี้

- 1) ปริมาณตัวอย่าง ตัวอย่างที่มีปริมาณมาก ๆ เช่น น้ำ ดิน แร่ เป็นต้น มักไม่เป็นปัญหาในการวิเคราะห์มากนัก เนื่องจากมีตัวอย่างเพียงพอสำหรับดำเนินการวิเคราะห์ แต่ในกรณีที่ตัวอย่างมีปริมาณน้อย ๆ ซึ่งระดับความเข้มข้นของสารที่สนใจอาจมีน้อยมากจนทำให้บางเทคนิคไม่สามารถตรวจวัดได้ หรืออาจมีอุปสรรคในการเตรียมตัวอย่าง หรืออาจมีการปนเปื้อนได้ง่าย
- 2) จำนวนของตัวอย่าง การเลือกรูปวิธีวิเคราะห์ที่รวดเร็วหรือมีขั้นตอนไม่ยุ่งยากมากนัก น่าจะเหมาะสมกับตัวอย่างที่มีจำนวนมาก ๆ
- 3) ความยุ่งยากการเตรียมตัวอย่างมากน้อยเพียงใด มีขั้นตอนซับซ้อนหรือต้องใช้เครื่องมือ อุปกรณ์เฉพาะที่ผู้ทดลองมีความพร้อมหรือไม่ เพราะการทดลองที่มีความซับซ้อนมาก โอกาสความคลาดเคลื่อนจะมากตามไปด้วย

4) ความแม่นยำและความเที่ยงที่ต้องการ เนื่องจากวิธีวิเคราะห์แต่ละวิธีมีความแม่นยำและความเที่ยงที่ต่างกัน วิธีวิเคราะห์ที่มีระดับความแม่นยำดีกว่าย่อมเป็นวิธีที่มีความน่าเชื่อถือมากกว่า แต่ผู้ทดลองอาจเลือกวิธีที่มีความแม่นยำในระดับยอมรับได้ เพื่อให้เหมาะสมกับความพร้อมของเครื่องมือ อุปกรณ์ เป็นต้น

5) ระดับความเข้มข้นของสารที่สนใจในตัวอย่าง ถ้าในตัวอย่างมีความเข้มข้นของสารที่สนใจน้อยมาก การเลือกวิธีวิเคราะห์ต้องสามารถวัดความเข้มข้นในระดับน้อย ๆ นั้นได้ หรือต้องมีวิธีเพิ่มความเข้มข้น (preconcentration) เพื่อให้เครื่องมือที่สามารถวิเคราะห์ค่าได้อย่างถูกต้อง

6) ความพร้อมของเครื่องมือวิเคราะห์ อุปกรณ์และสารเคมี ที่มีอยู่ในห้องปฏิบัติการ เพราะการเลือกวิธีวิเคราะห์ที่ผู้ทดลองไม่มีความพร้อมด้านเครื่องมือวิเคราะห์ อุปกรณ์และสารเคมี อาจทำให้ต้องใช้งบประมาณมากในการจัดหา หรือส่งวิเคราะห์จากหน่วยงานอื่น ๆ

7) ค่าใช้จ่าย วิธีวิเคราะห์ที่มีค่าใช้จ่ายต่อตัวอย่างสูงไม่เหมาะกับตัวอย่างที่มีจำนวนมาก ๆ แม้ว่าจะมีความแม่นยำสูงก็ตาม ผู้ทดลองควรเลือกวิธีวิเคราะห์ที่ค่าใช้จ่ายไม่สูงมากนักแต่ยังให้ผลที่ยอมรับได้

8) ระยะเวลาในการวัดต่อตัวอย่าง ในการวัดด้วยเครื่องมือวิเคราะห์อาจไม่แตกต่างกันมากนัก แต่ระยะเวลาส่วนใหญ่จะเป็นขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง

9) ควรเลือกวิธีที่เป็นวิธีมาตรฐานที่เป็นที่ยอมรับ หรือวิธีที่มีรายงานมาก่อน เนื่องจากวิธีเหล่านั้นได้รับการตรวจสอบความใช้ได้มาแล้ว

การเลือกวิธีวิเคราะห์ต้องพิจารณาจากปัจจัยข้างต้นเพื่อเลือกวิธีที่เหมาะสมกับงานมากที่สุด ซึ่งไม่มีวิธีวิเคราะห์ใดที่สมบูรณ์ตามความต้องการได้ทั้งหมด ผู้ทดลองควรเลือกวิธีวิเคราะห์ที่สามารถให้ผลการวิเคราะห์ในระดับความแม่นยำที่ต้องการหรือยอมรับได้ ค่าใช้จ่ายไม่สูงเกินไป ทำได้ง่าย เครื่องมือมีประจำในห้องปฏิบัติการ เช่น เมื่อต้องการวิเคราะห์ปริมาณไอออนเหล็กในน้ำดื่มบรรจุขวดซึ่งมีความเข้มข้นระดับส่วนในล้านส่วน (part per million; ppm) ซึ่งเป็นระดับความเข้มข้นที่ต่ำมาก ๆ การเลือกวิธีวิเคราะห์โดยน้ำหนักระหว่างทำให้เกิดตะกอน หรือวิธีไทเทรตปฏิกิริยารีดอกซ์ (redox titration) จะไม่เหมาะสมด้านสภาพแวดล้อมที่เกิดความคลาดเคลื่อนมีสูงมาก ดังนั้น ผู้ทดลองควรเลือกวิธีวิเคราะห์ทางสเปกโทรสโกปี เนื่องจากมีสภาพแวดล้อมที่ดีกว่า เช่น วิธียูวี-วิสิเบิลสเปกโตรเมตรี โดยอาศัยการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนที่เสถียรที่ดูดกลืนแสงได้ แม้ว่าช่วงขีดจำกัดในการตรวจวัดด้อยกว่าวิธีอะตอมมิคสเปกโทรสโกปี เช่น AAS หรือ ICP-OES และใช้เวลามากกว่า แต่ค่าใช้จ่ายในการวิเคราะห์ต่อตัวอย่างน้อยกว่ามาก และความแม่นยำอยู่ในระดับยอมรับได้

วิธีวิเคราะห์แต่ละวิธีมีข้อดีและข้อด้อยที่ต่างกัน บางวิธีมีข้อดีด้านความแม่นยำ รวดเร็ว แต่ข้อด้อยต้องใช้ค่าใช้จ่ายสูง การเลือกวิธีวิเคราะห์จำเป็นต้องพิจารณาปัจจัยประกอบหลาย ๆ ด้าน ดังตารางที่ 1.1 แสดงเปรียบเทียบปัจจัยที่ใช้ในการพิจารณาเลือกวิธีการวิเคราะห์ที่เหมาะสม (Christian, Dasgupta, & Schug, 2014).

ตารางที่ 1.1 การเปรียบเทียบวิธีการวิเคราะห์ต่าง ๆ

วิธีการวิเคราะห์	ช่วงความเข้มข้น (mol/L)	ช่วงความ เที่ยง (%)	สภาพจำเพาะ	ความเร็ว	ค่าใช้จ่าย
การวิเคราะห์โดยน้ำหนัก	10^{-1} - 10^{-2}	0.1	ต่ำ-ปานกลาง	ช้า	น้อย
ปริมาตรวิเคราะห์	10^{-1} - 10^{-4}	0.1-1	ต่ำ-ปานกลาง	ปานกลาง	น้อย
โพเทนชิโอเมตรี	10^{-1} - 10^{-6}	2	ดี	เร็ว	น้อย
คูโลเมตรี	10^{-1} - 10^{-4}	0.01-2	ปานกลาง	ช้า	ปานกลาง
โวลแทมเมตรี	10^{-1} - 10^{-10}	2-5	ดี	ปานกลาง	ปานกลาง
สเปกโทรโฟโตเมตรี	10^{-1} - 10^{-6}	2	ดี	เร็ว	ปานกลาง
ฟลูออโรเมตรี	10^{-1} - 10^{-9}	2-5	ปานกลาง	ปานกลาง	ปานกลาง
อะตอมมิกสเปกโทรสโกปี	10^{-1} - 10^{-9}	2-10	ดี	เร็ว	ปานกลาง
โครมาโทกราฟี	10^{-1} - 10^{-9}	2-5	ดี	เร็ว	ปานกลาง
จลนพลศาสตร์	10^{-1} - 10^{-10}	2-10	ดี	เร็ว	ปานกลาง

การดำเนินการวิเคราะห์ตามวิธีมาตรฐาน เป็นแนวทางหนึ่งที่ยอมรับสำหรับการวิเคราะห์สารที่สนใจ เนื่องจากวิธีมาตรฐานได้กำหนดขั้นตอนปฏิบัติงานที่เกี่ยวกับการวิเคราะห์ทั้งกระบวนการ ตั้งแต่การชักตัวอย่าง การเตรียมตัวอย่าง การวัดปริมาณและชนิดเครื่องมือวิเคราะห์ เป็นต้น การเลือกวิธีวิเคราะห์ที่เหมาะสมกับประเภทตัวอย่างต้องพิจารณาดังนี้

1) วิธีมาตรฐานระดับนานาชาติ (international standard) เป็นวิธีมาตรฐานที่ได้จากข้อตกลงร่วมกันของประเทศสมาชิกต่าง ๆ ที่มีความสนใจร่วมกัน เช่น วิธีมาตรฐาน ISO (International Standards Organization) ตัวอย่างเช่น ISO/TS15495 | IDF/RM 230: 2010, Milk, milk products and infant formulae guidelines for the quantitative determination of melamine and cyanuric acid by LC-MS/MS เป็นวิธีที่ใช้สำหรับการวิเคราะห์ปริมาณของเมลามีนและกรดไซยานูริก ในผลิตภัณฑ์นมสำหรับเด็กทารกโดยวิธีโครมาโทกราฟีของเหลวร่วมกับเทคนิควิเคราะห์มวลหรือแมสสเปกโตรมิเตอร์ (LC-MS/MS) ซึ่งวิธีมาตรฐาน ISO สามารถสืบค้นได้ที่ <https://www.iso.org>

2) วิธีมาตรฐานระดับภูมิภาค (regional standard) เป็นวิธีมาตรฐานที่พัฒนาขึ้นจากการประชุม หรือปรึกษาหารือกันระหว่างประเทศในกลุ่มภูมิภาคเดียวกัน แล้วกำหนดข้อตกลงร่วมกัน โดยส่วนมากจะเป็นการปรับมาจากมาตรฐานระดับประเทศในภูมิภาคเดียวกัน เช่น วิธีมาตรฐานของสหภาพยุโรป (European standard; EU) หรือ European Norm (EN) ที่พัฒนาและเผยแพร่โดย European Committee for Standardization (CEN) หรือในภาษาฝรั่งเศสคือ Commitee Europeen de Normalisation ตัวอย่างเช่น วิธี EN 1233: 1996 Water quality-determination of chromium-atomic absorption spectrometric methods เป็นวิธีมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์ปริมาณของโครเมียมในน้ำโดยวิธีอะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโตรเมตรี หรือวิธี EN 14084: 2003 Foodstuffs-determination of trace elements-determination of lead, cadmium, zinc, copper and iron by AAS after microwave digestion เป็นวิธีสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณของธาตุปริมาณน้อยมาก

ในอาหารโดยวิธีอะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรเมตรี ซึ่งวิธีมาตรฐาน EN สามารถสืบค้นได้ที่ <https://www.cen.eu>

3) วิธีมาตรฐานระดับประเทศ (national standard) เป็นวิธีมาตรฐานที่พัฒนาจากการประชุมหารือเพื่อหาข้อตกลงร่วมกันของผู้เกี่ยวข้องหลายฝ่ายในประเทศ โดยมีหน่วยงานมาตรฐานของประเทศนั้น ๆ เป็นศูนย์กลาง เช่น มาตรฐานผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรม (มอก.) ของประเทศไทยที่กำหนดโดยสำนักงานมาตรฐานผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรม (สมอ.)

มาตรฐานระดับประเทศที่นิยมใช้กันอย่างกว้างขวาง ได้แก่ Japanese Industrial Standard (JIS) ของประเทศญี่ปุ่น และ British Standard (BS) ของสหราชอาณาจักร

ประเทศสหรัฐอเมริกามีมาตรฐานระดับประเทศที่ยอมรับและนิยมใช้กันทั่วโลก ได้แก่ มาตรฐาน USEPA, APHA, American Water Works Association (AWWA), National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH), Occupational Safety and Health Administration (OSHA) ตัวอย่างเช่น ในการวิเคราะห์น้ำและน้ำเสีย ห้องปฏิบัติการส่วนมากมักใช้มาตรฐาน Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater (22nd Ed., 2012) ของ APHA, AWWA และ Water Environment Federation

4) วิธีมาตรฐานระดับสมาคม (association standard) เป็นวิธีมาตรฐานที่กำหนดขึ้นจากกลุ่มบริษัทหรือโดยกลุ่มบุคคลที่อยู่ในวงการค้าเดียวกัน หรือเกิดจากข้อตกลงของกลุ่มบริษัทหรือโรงงานที่มีกิจกรรมของอุตสาหกรรมเป็นอย่างเดียวกัน หรือมีการผลิตของชนิดเดียวกัน ตัวอย่างเช่น American Association of Textile Chemists and Colorists (AATCC) เป็นสถาบันมาตรฐานของประเทศสหรัฐอเมริกาที่เกี่ยวกับการกำหนดมาตรฐานการควบคุมคุณภาพมาตรฐานการทดสอบของวัสดุสิ่งทอและสิ่งย้อมสิ่งทอที่ได้รับการยอมรับและนิยมใช้ทั่วโลก เช่น AATCC 112: 2014 Formaldehyde release from fabric, Determination of: sealed Jar method เป็นต้น

5) วิธีมาตรฐานที่ตีพิมพ์โดยองค์กรทางวิชาการที่มีชื่อเสียงและเป็นที่ยอมรับ ในปัจจุบันมีหลายองค์กรที่เป็นที่ยอมรับในระดับนานาชาติ เช่น ASTM ตัวอย่างเช่น ASTM D5630-13 Standard test method for ash content in plastics ใช้สำหรับการวิเคราะห์ปริมาณเถ้าทั้งหมดในพลาสติก และ Association of Official Analytical Chemists (AOAC) ตัวอย่างเช่น AOAC Official Method 999.10 lead, copper, zinc and iron in foods: Atomic absorption spectrometry after microwave digestion ใช้สำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณของโลหะหนักต่าง ๆ ในอาหารโดยวิธีอะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรเมตรี

- วิธีมาตรฐาน ASTM เป็นวิธีการวิเคราะห์ที่สารตัวอย่างเป็นวัสดุอุตสาหกรรม โลหะ ยาง พลาสติก รวมถึงลักษณะและการทำงานของวัสดุ ผลิตภัณฑ์ การบริการ ระบบการใช้งาน เป็นต้น โดยสมาคมวิชาชีพทางด้านวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี

- วิธีมาตรฐานตาม AOAC หรือเรียกว่า AOAC method เป็นวิธีมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์ตัวอย่างเป็นอาหาร ยา เครื่องสำอาง เคมีภัณฑ์ที่ใช้ทางการเกษตร ปุ๋ย อาหารสัตว์ ผลิตภัณฑ์นม เป็นต้น วิธีมาตรฐาน AOAC แบ่งตามผลิตภัณฑ์ที่ทดสอบหรือวิธีทดสอบ เช่น ปุ๋ย อาหารสัตว์ น้ำและเกลือ เครื่องสำอาง ยา ผักแปรรูป เนื้อสัตว์ และผลิตภัณฑ์อาหารเสริม (dietary

supplements) สารฆ่าเชื้อ (disinfectants) สารตกค้าง วัตถุปรุงแต่งอาหาร วิธีทดสอบทางจุลชีววิทยา วิธีมาตรฐานตาม AOAC สามารถสืบค้นได้ที่ www.aoac.org

- วิธีมาตรฐานตาม AOCS (American Oil Chemists' Society) เป็นวิธีที่กำหนดโดยสมาคมด้านเคมีเกี่ยวกับไขมันและน้ำมันจากพืช วิธี AOCS เป็นวิธีทดสอบมาตรฐานที่ใช้ในกระบวนการผลิต การค้า การประยุกต์ใช้และการประเมินผลิตภัณฑ์ไขมัน น้ำมัน และลิพิด (lipid) ซึ่งทั่วโลกยอมรับ เช่น AOCS official method Ca 12-55 Phosphorus ใช้สำหรับวิเคราะห์ปริมาณฟอสฟอรัสรวมในตัวอย่างไขมันโดยวิธียูวี-วิสิเบิลสเปกโตรเมตรี

- วิธีมาตรฐาน standard methods for the examination of water and wastewater เป็นวิธีมาตรฐานในการวิเคราะห์ตัวอย่างที่เป็นน้ำ (น้ำผิวดิน น้ำบาดาล) น้ำทิ้งและน้ำเสีย ซึ่งวิธีมาตรฐานนี้เป็นตามข้อกำหนดของ APHA และ AWWA ประเทศสหรัฐอเมริกา สามารถสืบค้นได้ที่ <https://www.standardmethods.org/>

- วิธีมาตรฐาน EPA (USEPA method) เป็นวิธีมาตรฐานที่ใช้อ้างอิงสำหรับการตรวจสอบตัวอย่างทางสิ่งแวดล้อมและทางด้านชีวภาพ

- มาตรฐาน NIOSH เกี่ยวข้องกับการชักตัวอย่างอากาศในสถานที่ทำงาน หรือสำหรับการชักและวิเคราะห์ในงานอาชีวอนามัย ได้จัดทำคู่มือมาตรฐานในการชักและวิเคราะห์ตัวอย่างอากาศ และกำหนดค่ามาตรฐานสารเคมีในบรรยากาศการทำงาน (recommended exposure limits, RELs) ของบุคคลที่เกี่ยวข้องกับการสัมผัสอากาศ ซึ่งมาตรฐาน NIOSH สามารถสืบค้นความรู้เพิ่มเติมได้ที่ <http://www.cdc.gov/niosh>

6) วิธีในตำราหรือวิธีที่ตีพิมพ์ในวารสารทางวิชาการที่เกี่ยวข้อง ตัวอย่างเช่น

- วิธีในหนังสือ/ตำราทางเคมีวิเคราะห์ เช่น Quantitative Chemical Analysis (Harris, 2015)

- วิธีมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์อาหาร โดยกรมวิทยาศาสตร์การแพทย์ กระทรวงสาธารณสุข ประเทศไทย สืบค้นออนไลน์ได้ที่ <http://bqsf.dmsc.moph.go.th>

- วิธีวิเคราะห์ทางเคมีในดิน ในตำรา Soil Sampling and Methods of Analysis (Carter & Gregorich, 2007)

สำหรับวิธีที่ตีพิมพ์ในวารสารทางวิชาการที่เกี่ยวข้อง โดยส่วนใหญ่เป็นวิธีที่พัฒนาขึ้นเพื่อเพิ่มสภาพไวการวิเคราะห์ให้มากขึ้น พัฒนาให้สามารถตรวจวัดในระดับความเข้มข้นต่ำ ๆ ได้มากขึ้น เช่น วารสารด้านเคมีวิเคราะห์ ได้แก่ Analytical Chemistry, Journal of Chromatography A, Analytica Chimica Acta, Food Chemistry, Analyst, Microchimica Acta, Talanta และ Analytical Letters ตัวอย่างบทความวิจัย เช่น

- Visual and colorimetric detection of mercury(II) ion using gold nanoparticles stabilized with a dithia-diaza ligand โดยวรวิทย์ จันทร์สุวรรณ และอภิชาติ อิมยัม (Chansuvarn & Imyim, 2012) เป็นวิธีวิเคราะห์ปรอท (mercury) ที่มีความเข้มข้นต่ำโดยอาศัยการเปลี่ยนแปลงสมบัติของอนุภาคนาโนเมตรของทองคำ โดยสามารถตรวจวัดด้วยตาเปล่า (naked-eye detection) และวิธียูวี-วิสิเบิลสเปกโตรเมตรี

- Simple spectrophotometric method for determination of melamine in liquid milks based on green Mannich reaction โดยวรวิทย์ จันทร์สุวรรณ, สิริรัตน์ พานิช และ อภิชาติ อิ่มยิ้ม (Chansuvarn, Panich, & Imyim, 2013) ซึ่งเป็นการพัฒนาวิธีวิเคราะห์อย่างง่ายสำหรับหาปริมาณเมลามีนในตัวอย่างนมด้วยเทคนิคยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรเมตรี

วิธีวิเคราะห์เหล่านี้ต้องได้รับการทวนสอบความใช้ได้ (method verification) ว่าสามารถดำเนินการได้ แต่ถ้าหากไม่มีมาตรฐานข้างต้นหรือไม่สามารถปฏิบัติตามได้ ผู้ปฏิบัติงานสามารถพัฒนาวิธีวิเคราะห์ขึ้นเองได้ แต่ต้องตรวจสอบความใช้ได้ของวิธีการวิเคราะห์ (method validation) ในคุณลักษณะเฉพาะที่แสดงสมบัติของวิธีวิเคราะห์ (method performance characteristics) เหมาะสม ซึ่ง The International Council for Harmonization (ICH) ได้กำหนดแนวทางและข้อแนะนำเกี่ยวกับคุณลักษณะเฉพาะที่แสดงสมบัติของวิธีวิเคราะห์ ประกอบด้วย สภาพจำเพาะ ความแม่นยำ ความเที่ยง ชัดจำกัดในการตรวจวัด ชัดจำกัดในการวัดเชิงปริมาณ สภาพไว ช่วงการใช้งาน ความสัมพันธ์เชิงเส้นตรง ความคงทน และการกลับคืนของสารที่ทราบปริมาณ

ขั้นตอนที่ 3 การชักตัวอย่าง (sampling)

ในกรณีการพิจารณาปัญหาเกิดจากตัวอย่างที่มีจำนวนหรือปริมาณมาก จนไม่สามารถนำตัวอย่างทั้งหมดมาทำการวิเคราะห์ได้ เช่น น้ำในแม่น้ำ ดินในแปลงการเกษตร ยาที่จำหน่ายตามท้องตลาด เมล็ดข้าว เป็นต้น การชักตัวอย่างเป็นการลดจำนวนหรือปริมาณสารตัวอย่างโดยทำการสุ่มเอาตัวอย่างมาเป็นตัวแทนของสารตัวอย่างทั้งหมดที่สนใจศึกษา

การสุ่มชักตัวอย่าง (random sampling) อย่างเป็นระบบจึงเป็นวิธีลดปริมาณสารตัวอย่างโดยที่ผลการวิเคราะห์ในตัวอย่างนั้น ๆ ที่ออกมาจะต้องเป็นผลลัพธ์แทนจำนวนประชากรทั้งหมด ดังนั้น การชักตัวอย่างใด ๆ ก็ตาม ผู้ทำการทดลองต้องศึกษาวิธีการชักตัวอย่างจากพื้นที่ และการเก็บรักษาตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์สารที่สนใจนั้น ๆ นอกจากนี้ต้องคำนึงถึงองค์ประกอบด้านกายภาพและทางเคมีของตัวอย่าง สารที่สนใจ และตัวกลาง ขั้นตอนการชักตัวอย่างต้องสัมพันธ์กับสารที่สนใจวิเคราะห์ด้วย ดังนั้น วิธีการชักตัวอย่างจึงมีจำนวนมากตามประเภทสารตัวอย่าง ชนิดสารที่สนใจ สถานะกายภาพ เป็นต้น ซึ่งไม่สามารถอธิบายได้ทั้งหมด อย่างไรก็ตาม การชักตัวอย่างโดยหลักพื้นฐานควรคำนึงถึงปัจจัย ดังต่อไปนี้

- 1) ความเป็นตัวแทน (representative) ตัวอย่างที่เก็บมาต้องสามารถใช้เป็นตัวแทนเพื่อวิเคราะห์หาสารที่สนใจได้

- 2) จำนวน (number) และปริมาณ (quantity) สารตัวอย่างที่เก็บมาต้องมีปริมาณมากพอที่จะทำการทดลองซ้ำได้อย่างน้อย 2 ครั้ง หรือมากกว่า จำนวนและความถี่จะต้องสอดคล้องกับชนิดตัวอย่างหรือกลุ่มประชากร

- 3) วิธีการ (procedure) และการเก็บรักษาตัวอย่าง (reservation) มีความเหมาะสมไม่ทำให้องค์ประกอบของตัวอย่างเปลี่ยนแปลง ที่อาจส่งผลการวิเคราะห์คลาดเคลื่อนทั้งทางบวกหรือทางลบ เช่น ผลจากการดูดซับโดยภาชนะเก็บหรือภาชนะบรรจุตัวอย่าง การสลายตัวจากความร้อนหรือการปนเปื้อนจากสารเคมีที่เติม และการเกิดปฏิกิริยากับแสงหรืออากาศ เป็นต้น

วิธีการชักตัวอย่างที่เป็นของเหลว ของแข็ง และอากาศ วิธีการชักตัวอย่าง อุปกรณ์ เครื่องมือ และการเก็บรักษาตัวอย่าง รายละเอียดกล่าวไว้ในบทที่ 3

ขั้นตอนที่ 4 การเตรียมสารตัวอย่าง (sample preparation)

ตัวอย่างที่ผ่านการชักตัวอย่างและการลดขนาดตัวอย่างลงแล้ว ไม่ว่าจะอยู่ในสถานะใดก็ตาม ถ้าสถานะนั้นไม่ได้เป็นสถานะที่เหมาะสมกับการวัดด้วยวิธีวิเคราะห์ หรือเครื่องมือวิเคราะห์ หรือเป็นสถานะที่เหมาะสมแต่ต้องทำการกำจัดตัวรบกวน ตัวอย่างเหล่านั้นต้องผ่านขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างก่อน ดังนั้น การเตรียมตัวอย่างจึงเป็นการทำให้ตัวอย่างอยู่ในรูปที่เหมาะสมไม่ว่าจะเป็นรูปทางเคมี (chemical form) หรือรูปทางกายภาพ (physical form) ที่จะทำการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคเฉพาะต่อไป โดยหลักการของการวิเคราะห์ด้วยวิธีใด ๆ นั้น การเตรียมตัวอย่างต้องสอดคล้องกับวิธีวิเคราะห์และเทคนิคการวิเคราะห์ การเตรียมตัวอย่างอาจเป็นเพียงการดำเนินการกับสารตัวอย่างอย่างง่าย ๆ เช่น การบด การละลาย การกรอง การทำให้แห้ง การคัดเลือกขนาด เป็นต้น หรืออาจมีขั้นตอนซับซ้อนมากขึ้น เช่น การย่อยโดยใช้กรด (wet digestion หรือ acid digestion) การสกัดด้วยตัวทำละลาย (solvent extraction) แล้วต้องทำให้บริสุทธิ์ (purification) ด้วยการแยกด้วยคอลัมน์ หรือเป็นวิธีที่ต้องใช้อุปกรณ์ เครื่องมือเฉพาะ เช่น การย่อยด้วยคลื่นไมโครเวฟ ต้องอาศัยคลื่นไมโครเวฟเป็นแหล่งพลังงานแก่สารตัวอย่างแทนการให้ความร้อนด้วยเตาไฟฟ้า (รายละเอียดวิธีการเตรียมตัวอย่างกล่าวไว้ในบทที่ 3)

วิธีการเตรียมตัวอย่างขึ้นอยู่กับวิธีวิเคราะห์ เทคนิคการวิเคราะห์ ประเภทตัวอย่าง และชนิดสารที่สนใจ เช่น การหาปริมาณโลหะแคดเมียม (Cd) ในเมล็ดข้าว ตัวอย่างเมล็ดข้าวที่เป็นของแข็งต้องทำการเตรียมโดยการย่อยสลาย (decomposition) หรือสกัด (extraction) หรือวิธีอื่น ๆ ให้อยู่ในรูปสารละลาย เพื่อให้เหมาะสมกับการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี เช่น AAS หรือ ICP-OES นอกจากนี้ การเตรียมตัวอย่างยังรวมถึงการทำให้ความเข้มข้นของสารที่สนใจที่มัน้อย ๆ ให้มีปริมาณเพิ่มขึ้น (preconcentration) เพื่อให้การวิเคราะห์สามารถวิเคราะห์ได้อย่างถูกต้อง

การเตรียมตัวอย่างถือได้ว่าเป็นมีความสำคัญมาก นอกจากจะเป็นขั้นตอนในการให้ได้มาซึ่งรูปทางเคมีที่เหมาะสมแล้ว ยังถือได้ว่าเป็นการบ่งชี้ถึงความแม่นยำในการวิเคราะห์สารที่สนใจในตัวอย่าง ถ้ากระบวนการเตรียมตัวอย่างนั้นกระทำอย่างไม่สมบูรณ์ ปริมาณสารที่สนใจที่วิเคราะห์ได้จะไม่ได้เป็นปริมาณแท้จริงในตัวอย่าง จากรายงานวิจัยของเอลลิซันและฮาร์ดคาสเติล (Ellison & Hardcastle, 2012) สำนวนความคลาดเคลื่อนจากการทดลองของกลุ่มตัวอย่างพบว่า ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างเป็นสาเหตุของความคลาดเคลื่อนมากที่สุด และเมื่อรวมกับความคลาดเคลื่อนที่อาจเกิดขึ้นอย่างง่าย ๆ เช่น การคลาดเคลื่อนจากบุคคล หรือจากเครื่องมือวิเคราะห์แล้ว พบว่ามีความคลาดเคลื่อนรวมประมาณร้อยละ 44 และความคลาดเคลื่อนจากขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างจะเกิดขึ้นได้มากยิ่งขึ้นในกรณีที่เป็นการวิเคราะห์สารปริมาณน้อยมาก (trace analysis)

ขั้นตอนที่ 5 การวัด (measurement)

การวัดเป็นขั้นตอนการวัดสัญญาณตอบสนองหรือสัญญาณเปลี่ยนแปลงของสารที่สนใจ เช่น วิธีวิเคราะห์เป็นการตกตะกอน การวัดทำได้โดยการชั่งน้ำหนักของรูปตะกอนที่เกิดขึ้น หรือวิธีวิเคราะห์

เป็นปริมาตรวิเคราะห์ การวัดจะเป็นการวัดปริมาตรตัวไทเทรตที่จุดยุติ อย่างไรก็ตาม การวัดจะเป็นแบบใดขึ้นกับวิธีวิเคราะห์ เทคนิค และเครื่องมือวิเคราะห์ เช่น การวัดโดยใช้เครื่องมือวิเคราะห์จะเป็นการวัดสัญญาณการเปลี่ยนแปลงอย่างหนึ่งอย่างใดที่เกิดขึ้น หรือสัญญาณตอบสนองที่สัมพันธ์กับปริมาณของอนุสารที่สนใจในตัวอย่าง เช่น การวัดการดูดกลืนแสง โดยความเข้มของแสงที่ถูกดูดกลืนเป็นส่วนโดยตรงกับความเข้มข้นของสารที่สนใจ

นอกจากนี้การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ เช่น การพิสูจน์แคตไอออนหรือแอนไอออน การทดสอบด้วยเปลวไฟ (flame test) การละลาย หรือการเกิดตะกอน จัดเป็นการวัดเช่นกัน ดังนั้น ในขั้นตอนของการวัดจึงเป็นขั้นตอนที่จะทำให้ผู้ทดลองทราบถึงชนิดหรือปริมาณของสารที่สนใจ โดยอาศัยสัญญาณตอบสนองจากสมบัติ หรือองค์ประกอบของสารที่สนใจต่อเทคนิคการวิเคราะห์เฉพาะนั้น ๆ ดังตารางที่ 1.2 แสดงเทคนิควิเคราะห์ด้วยเครื่องมือตามสมบัติทางกายภาพหรือสมบัติทางเคมีของสารที่สนใจที่เกิดการเปลี่ยนแปลงอย่างหนึ่งอย่างใด เช่น สารที่สนใจที่สามารถดูดกลืนแสงในย่านยูวี-วิสิเบิลได้ เทคนิคที่เกี่ยวข้องกับการวัดสมบัติการดูดกลืนแสงได้คือ เทคนิคสเปกโทรโฟโตเมตรี ซึ่งอาจมีหลายวิธีตามสมบัติของสารที่สนใจ เช่น วิธียูวี-วิสิเบิลสเปกโทรโฟโตเมตรี เหมาะกับสารที่สนใจอยู่ในรูปโมเลกุลหรือสารประกอบ หรือไอออน แต่วิธีอะตอมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรีเหมาะกับสารที่สนใจเป็นธาตุ เป็นต้น

จะเห็นได้ว่าเทคนิคการวิเคราะห์ด้วยเครื่องมือมีหลากหลายเทคนิคที่เกิดจากการวัดสมบัติอย่างใดอย่างหนึ่ง หรือสมบัติบางประการของสารที่สนใจปรากฏสัญญาณตอบสนองออกมา และแม้เป็นการวัดสมบัติอย่างเดียวกัน ยังมีเทคนิคการวิเคราะห์แยกย่อยไปอีกตามความเฉพาะของชนิดของธาตุ เช่น เทคนิคอะตอมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรี อาจจำแนกแยกย่อยตามชนิดวิธีทำให้เกิดอะตอมอิสระของธาตุ เช่น วิธีอะตอมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรีแบบเปลวไฟ (FAAS หรือเรียกทั่วไปคือ AAS) เป็นการทำให้เกิดอะตอมอิสระของธาตุด้วยเปลวไฟของแก๊สเชื้อเพลิง (อากาศและอะซิทีลีน) วิธีแกรไฟต์เฟอร์เนซ-อะตอมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรี (graphite furnace; GF-AAS) เป็นการทำให้เกิดอะตอมอิสระของธาตุด้วยความร้อนจากไฟฟ้า วิธีไฮโดรด์เจนเนอเรชัน-อะตอมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรี (hydride generation; HG-AAS) เป็นเทคนิคการวิเคราะห์ธาตุที่สามารถเกิดเป็นสารประกอบไฮโดรด์ได้ เช่น สารหนู (As) และซีลีเนียม (Se) และวิธีโคลด์เวเปอร์-อะตอมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรี (cold vapor; CV-AAS) เป็นเทคนิควิเคราะห์ธาตุปรอท (Hg) เป็นต้น

ตารางที่ 1.2 เทคนิคการวิเคราะห์ตามสมบัติทางกายภาพหรือเคมีของสารที่สนใจ

สมบัติ	เทคนิควิเคราะห์ด้วยเครื่องมือ
การเปล่งออก	อิมิสชันสเปกโทรสโกปี (emission spectroscopy) • อินดักทีฟพลาสมาอะตอมออปติคอลอิมิสชันสเปกโทรโฟโตเมตรี ฟลูออเรสเซนซ์ (fluorescence) หรือ การวาวแสง ฟอสฟอเรสเซนซ์ (phosphorescence) หรือ การเรืองแสง ลูมิเนสเซนซ์ (luminescence) หรือ การเปล่งแสง • เคมีลูมิเนสเซนซ์ (chemiluminescence) หรือ การเปล่งแสงทางเคมี
การดูดกลืนแสง	สเปกโทรโฟโตเมตรี (spectrophotometry) • อะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรี - แกรฟิต์เฟอร์เนซ-อะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรี - ไฮโดรเจนเนอเรนซ์-อะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรี - โคลด์เวเพอร์-อะตอมมิกแอบซอร์บชันสเปกโทรโฟโตเมตรี • ยูวี-วิสิเบิลสเปกโทรโฟโตเมตรี (UV-vis) • อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (IR) โฟโตเมตรี (photometry) โฟโตอะคูสติก (photoacoustic) นิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ อิเล็กตรอนสปินเรโซแนนซ์
การกระเจิงแสง	เทอบิดิเมตรี (turbidimetry) เนเฟโลเมตรี (nephelometry) รามาน (Raman spectroscopy)
การหักเหแสง	รีแฟรกโตเมตรี (refractometry) อินเตอร์ฟีรอมเมตรี (interferometry)
การเลี้ยวเบนแสง	เอกซเรย์ (X-ray) อิเล็กตรอนดิฟแฟรกโตเมตรี (electron diffractometry)
การหมุน	โพลาริเมตรี (polarimetry)
ศักย์ไฟฟ้า	โพเทนชิโอเมตรี
ประจุไฟฟ้า	คูโลเมตรี
กระแสไฟฟ้า	แอมเพโรเมตรี โพลารोगราฟี โวลแทมเมตรี
ความต้านทานไฟฟ้า	คอนดักโตเมตรี
มวล	การตกตะกอน (gravimetry)
อัตราส่วนมวลต่อประจุ	แมสสเปกโตรเมตรี (mass spectrometry) หรือ การวิเคราะห์มวล
อัตราปฏิกิริยา	จลนพลศาสตร์ (kinetics)

ตารางที่ 1.2 เทคนิคการวิเคราะห์ตามสมบัติทางกายภาพหรือเคมีของสารที่สนใจ (ต่อ)

สมบัติ	เทคนิควิเคราะห์ด้วยเครื่องมือ
ความร้อน	การวิเคราะห์โดยน้ำหนักด้วยความร้อน (thermal gravimetry)
ปริมาตร	การไทเทรต (titrimetry)

ขั้นตอนที่ 6 การจัดการข้อมูล (data processing)

ขั้นตอนการแปรผลที่ได้จากการวัดให้เป็นค่าตัวเลขจะต้องอาศัยความรู้พื้นฐานเกี่ยวกับปฏิกิริยาเคมี สมการเคมี และปริมาณสัมพันธ์ เนื่องจากตัวเลขหรือสัญญาณที่ได้จากการวัดอาจยังไม่ใช่คำตอบที่แท้จริง เช่น เมื่อชั่งน้ำหนักตะกอน ต้องทราบว่าตะกอนนั้นอยู่รูปทางเคมีแบบใด จึงจะสามารถคำนวณไอออน ธาตุ หรือโมเลกุลสารที่สนใจได้ และยังต้องคำนวณเทียบกับน้ำหนักของสารตัวอย่างที่ใช้เริ่มต้น หรือกรณีวิธีวิเคราะห์ที่เป็นสัญญาณตอบสนองที่วัดได้ต้องเทียบกับสัญญาณตอบสนองของสารละลายมาตรฐาน การคำนวณจะต้องอาศัยกราฟมาตรฐานความเข้มข้นมาหาปริมาณของสารที่สนใจ

การจัดการข้อมูลจึงเป็นขั้นตอนในการพิจารณาผลที่ได้จากการวัดก่อนที่จะรายงานเป็นปริมาณสารที่สนใจในสารตัวอย่าง ดังนั้น การจัดการข้อมูลยังเกี่ยวข้องกับการประเมินความน่าเชื่อถือ การวิเคราะห์ความคลาดเคลื่อน การตัดข้อมูลที่สงสัย และการวิเคราะห์เปรียบเทียบข้อมูลโดยอาศัยวิธีสถิติ ทั้งนี้ยังรวมถึงการตรวจสอบความใช้ได้ของวิธี (method validation) อีกด้วย (รายละเอียดของการประเมินความน่าเชื่อถือของข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์ กล่าวไว้ในบทที่ 4)

สรุป

เคมีวิเคราะห์เป็นการบูรณาการความรู้พื้นฐานทางเคมี และประยุกต์ใช้ความรู้พื้นฐาน หรือพัฒนาองค์ความรู้เป็นเทคนิคการวิเคราะห์ เพื่อหาคำตอบของสารที่สนใจในสารตัวอย่างทั้งเชิงคุณภาพ และ/หรือ เชิงปริมาณ โดยมีกระบวนการวิเคราะห์อย่างเป็นขั้นตอน คือ การพิจารณาปัญหาที่เกิดขึ้น หรือเหตุผลในการวิเคราะห์สารที่สนใจ ชนิดสารตัวอย่าง การเลือกวิธีวิเคราะห์ที่เหมาะสมกับชนิดและระดับความเข้มข้นของสารที่สนใจ วิธีการชักตัวอย่างที่เป็นตัวแทนของตัวอย่างทั้งหมด การเก็บรักษาตัวอย่างเพื่อรักษาสภาพหรือสมบัติทางเคมีและกายภาพไม่ให้เปลี่ยนแปลงก่อนดำเนินการเตรียมตัวอย่างโดยวิธีที่เหมาะสมและก่อนดำเนินการวิเคราะห์สารที่สนใจ การวัดด้วยวิธีมาตรฐานหรือเลือกเทคนิคการวิเคราะห์ที่มีความแม่นยำและความเที่ยงที่ยอมรับได้ และผู้ทดลองต้องสามารถแปรผลข้อมูลหรือสัญญาณตอบสนองที่ได้จากการทดลองเพื่อเป็นคำตอบที่ต้องการของสารที่สนใจที่สัมพันธ์กับตัวอย่าง เพื่อแสดงคำตอบที่แท้จริงในสารตัวอย่างนั้น ๆ ดังนั้น การวิเคราะห์นั้นต้องมีความแม่นยำ เพื่อแสดงความใกล้เคียงกับค่าแท้จริงให้มากที่สุดและต้องคำนึงถึงความคลาดเคลื่อนที่อาจเกิดขึ้นจากกระบวนการวิเคราะห์ในแต่ละขั้นตอน

แบบฝึกหัดท้ายบท

1. อธิบายความแตกต่างระหว่างการวิเคราะห์เชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ
2. อธิบายหลักการและความสำคัญในการชักตัวอย่าง
3. การเลือกวิธีวิเคราะห์ มีข้อพิจารณาจากปัจจัยใดบ้าง
4. อธิบายจุดประสงค์ของการสุ่มชักตัวอย่าง
5. จงอธิบายแนวทางการเตรียมตัวอย่างเนื้อปลา เพื่อทำการวิเคราะห์สารฟอร์มาลดีไฮด์ตกค้าง
6. ถ้าต้องการทราบสาเหตุที่ทำให้ปลาในแหล่งน้ำตายจำนวนมากในระยะเวลาสั้น ๆ เราควรมีแนวทางการกระบวนการวิเคราะห์อย่างไร
7. เมื่อมีผู้นำปลาที่ตายในแหล่งน้ำ เพื่อให้วิเคราะห์ปริมาณสารโลหะหนักในปลา เราควรมีหลักการเลือกวิธีวิเคราะห์ตามวิธีมาตรฐานใด เพราะเหตุใด
8. วิธีการวิเคราะห์แบบแผนเดิม (classic) กับแบบแผนใหม่ (modern) เหมือนกันหรือแตกต่างกันอย่างไร
9. การพัฒนาวิธีการวิเคราะห์ขึ้นมาใหม่ มีปัจจัยใดที่ต้องพิจารณาเป็นสำคัญ เพราะเหตุใด
10. ในการวิเคราะห์ตะกั่วตกค้างในตัวอย่างอาหาร และตัวอย่างน้ำเสีย ผู้วิเคราะห์สามารถเลือกใช้วิธีเดียวกันได้หรือไม่ เพราะเหตุใด

หน่วยทางเคมีและการเตรียมสารละลาย (Chemical Units and the Preparation of Reagents)

ปัจจุบันระบบการวัดทางวิทยาศาสตร์และวิศวกรรมศาสตร์ที่ได้รับการยอมรับและตกลงใช้ร่วมกันทั่วโลก คือ ระบบหน่วยเอสไอ (International System of Units หรือ SI units) ซึ่งย่อมาจากภาษาฝรั่งเศส *Système International d'Unités* หน่วยเอสไอ เป็นหน่วยวัดรูปแบบใหม่ของระบบเมตริก (metric system) ที่จัดทำขึ้นในที่ประชุม General Conference on Weights and Measures เมื่อปี ค.ศ. 1960 ระบบหน่วยเอสไอนิยมใช้อย่างกว้างขวางทั่วโลกทั้งทางด้านวิทยาศาสตร์ เทคโนโลยี วิศวกรรมศาสตร์ รวมถึงการค้าระหว่างประเทศ สถาบัน National Institute of Standards and Technology (NIST) ของสหรัฐอเมริกาจัดทำคู่มือแนะนำการใช้ระบบหน่วยเอสไออย่างถูกต้องและเป็นสากล “Guide for the use of the International System Units (SI)” ฉบับปรับปรุงปี ค.ศ. 2008 ในปัจจุบันหน่วยเอสไอประกอบด้วย 2 กลุ่ม (class) คือ หน่วยฐานเอสไอ (SI base units) และหน่วยอนุพัทธ์เอสไอ (SI derived units) และได้มีส่วนหน่วยเสริม (supplementary units) อีก 2 ประเภท คือ เรเดียน (radian) เป็นหน่วยของมุมระนาบ และสเตอเรเดียน (steradian) เป็นหน่วยของมุมตัน จัดอยู่ในกลุ่มหน่วยอนุพัทธ์เอสไอ การใช้ระบบหน่วยเอสไอได้อย่างถูกต้องจำเป็นต้องเรียนรู้กฎ และรูปแบบของการใช้หน่วยอนุพัทธ์เอสไอและคำนำหน้าหน่วยเอสไอ (SI prefixes) ที่จะใช้ร่วมกับหน่วยฐานเอสไอ

2.1 หน่วยเอสไอ

1. หน่วยฐานเอสไอ (SI base units) เป็นหน่วยวัดพื้นฐานของหน่วยวัดอื่น ๆ ทั้งหมดซึ่งสามารถสอบกลับได้ (traceability) หน่วยฐานทั้ง 7 หน่วย แสดงในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 หน่วยฐานเอสไอ (SI base units)

ปริมาณ	ชื่อหน่วย	สัญลักษณ์
ความยาว	เมตร (meter)	m
มวล	กิโลกรัม (kilogram)	kg
เวลา	วินาที (second)	s
กระแสไฟฟ้า	แอมแปร์ (ampere)	A
อุณหภูมิ	เคลวิน (kelvin)	K
ความเข้มของการส่องสว่าง	แคนเดลา (candela)	cd
ปริมาณของสาร	โมล (mole)	mol